N° d'ordre C.N.R.S. 7001

Aix Marseille

THESE

présentée

à l'UNIVERSITE DE PROVENCE

pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR ES-SCIENCES PHYSIQUES

par

Madame FOURNIER Josette
Ancienne élève de l'Ecole Normale Supérieure
de l'Enseignement Technique
Agrégée de l'Université
Docteur de spécialité

★ ★

CALCULS DE CONFORMATIONS SUR DES SYSTEMES TENDUS : TETRAMETHYL-1,1,3,3 CYCLOHEXANE, BICYCLO [3.1.1] HEPTANE, BICYCLO [3.2.1] OCTANE. EFFET REFLEXE

Soutenue le 17 Juin 1972 devant la Commission d'Examen.

MM. J.	METZGER	*Président*
P.	MAITTE	*Examinateurs*
J.C.	MAIRE	
B.	WAEGELL	
E.J.	VINCENT	
J.M.	LEHN	*Rapporteur extérieur*

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

ANNEXE A

RESULTATS NUMERIQUES :

- Coordonnées
- Angles de valence
- Angles dièdres
- Energies partielles
- Energie totale

ABREVIATIONS :

W_a : Energie d'interaction entre atomes non liés,

W_b : Energie de déformation des angles de valence,

W_d : Energie de déformation des angles dièdres,

W_{dp} : Energie d'interaction dipolaire,

W_L : Energie attractive Br...H,

$\Delta\theta$: Différence des valeurs numériques prises par la variable θ (angle), aux deux avant-derniers pas,

ΔW : Différence des valeurs numériques prises par ΣW, aux deux avant-derniers pas,

μ : Moments de liaison et moment dipolaire,

$\Sigma W = W_a + W_b + W_d + (W_{dp})$

La discussion de ces résultats se trouve dans la partie principale de la thèse (*), les figures correspondantes sont dans l'annexe B (**).

SOMMAIRE

Le numéro de page renvoie à la partie principale de cette thèse (*)
Les numéros de figures renvoient aux annexes A (*)et B (* * *).*

CHAPITRE I		p. 91
Cyclohexane	fig. 1 à 11	p. 92
Méthyl-cyclohexane	fig. 12 à 27	p. 101
Diméthyl-1,3 cyclohexane	fig. 28 à 32	p. 104
Tétraméthyl-1,1,3,3 cyclohexane	fig. 33 à 35	p. 106
CHAPITRE II		p. 108
Bicyclo (2.2.2) octane	fig. 38 à 40	p. 109
CHAPITRE III		p. 114
Cyclohexanone	fig. 41 à 49	p. 128
Tertiobutyl-4 cyclohexanone	fig. 50 à 51	p. 134
Tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone	fig. 52 à 58	p. 135
Cyclohexanone α bromée	fig. 61 à 70	p. 139
Tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone α bromée	fig. 71 à 80	p. 149
Dibromo-2,6 cyclohexanone	fig. 81 à 101	p. 155
Dibromo-2,6 tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone	fig. 102 à 121	p. 160
CHAPITRE IV		p. 168
Diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptane	fig. 122 à 128	p. 173
Bicyclo (3.1.1) heptane	fig. 129 à 133	p. 171
Diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-2	fig. 134 à 135	p. 174
Triméthyl-4,6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-2	fig. 136 à 139	p. 177
Diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3	fig. 140 à 146	p. 181
Triméthyl-2,6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3	fig. 147 à 150	p. 182

.../...

Tétraméthyl-2,4,6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3	fig. 151 à 152	p. 191
Dibromo-2,4 diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3	fig. 153 à 168	p. 192
Bromo-2 diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3	fig. 169 à 172	p. 196
Diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanol-3	fig. 173 à 175	p. 198
Tétraméthyl-2,4,6,6 bicyclo (3.1.1) heptanol-3	fig. 176 à 178	p. 201
CHAPITRE V		p. 207
Bicyclo (3.2.1) octane	fig. 179 à 184	p. 210
Bicyclo (3.2.1) octanone-3	fig. 185 à 194	p. 212
Bicyclo (3.2.1) octanone-3 α bromée	fig. 195 à 198	p. 216
Dibromo-2,4 bicyclo (3.2.1) octanone-3	fig. 199 à 220	p. 219
Bicyclo (3.2.1) octène-6 one-3	fig. 221 à 222	p. 226
Diméthyl-2,4 bicyclo (3.2.1) octène-6 one-3	fig. 223 à 226	p. 226
Tétraméthyl-2,2,4,4 bicyclo (3.2.1) octène-6 one-3	fig. 227 à 228	p. 226
Bicyclo (3.2.1) octanol-3	fig. 229 à 236	p. 229
Méthyl-3 bicyclo (3.2.1) octanol-3	fig. 237 à 244	p. 232
Bicyclo (3.2.1) octène-6 ol-3	fig. 245 à 252	p. 234
Comparaison entre ces alcools	fig. 253 à 254	
CHAPITRE VI		
Effet Réflexe	fig. 255 à 260	p. 241

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	- 1,267	0,855	0
3	1,258	1,886	1,128
4	- 0,004	2,746	1,091
5	- 1,263	1,882	1,131
6	- 1,267	0,855	0
7	2,150	0,202	0,106
8	1,356	1,375	- 0,970
9	1,318	1,366	2,100
10	2,147	2,534	1,038
11	- 0,004	3,437	1,952
12	- 0,006	3,355	0,170
13	- 1,316	1,357	2,101
14	- 2,154	2,528	1,043
15	- 2,150	0,200	0,102
16	- 1,353	1,379	- 0,968
17	0	- 0,652	0,891
18	0	- 0,655	- 0,888

Angles (d°)	
2.1.6	111,97
1.2.3	111,89
2.3.4	111,51
i	47,57
i	47,76
1.6.5	111,98
7.2.1	109,43
7.2.3	109,43
8.2.1	109,33
8.2.3	109,32
17.1.18	107,41
4.5.6	111,26
3.4.5	111,20
moyenne	
C-C-C	111,64
Hax-C-C	109,33
Heq-C-C	109,41
H-C-H	107,63
i	47,65

Dièdres (d°)	
moyenne	
C-C-C-C	54,24
Heq-C-C-Heq	63,24
Hax-C-C-Hax	172,03
Heq-C-C-Hax	54,40

Longueurs de Liaison (Å)	
C-C	1,528
C-H	1,104

Energie (Kcal/mole)	
Wa	- 5,289
Wb	0,181
Wd	0,400
Σ	- 4,708

$\Delta\theta_{2.1.6}$	21"
ΔW	$4\ 10^{-5}$ kcal

Cyclohexane

- chaise

30 variables

fonctions : C...C $16600\ e^{-3,63r} - 325/r^6$

C...H $30000\ e^{-4,17r} - 140/r^6$

H...H $10000\ e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4$ Å

$- 10,162\ r + 24,29$ $r < 2,4$ Å

FIGURE : 1

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,264	0,858	0
3	1,255	1,887	1,129
4	- 0,004	2,751	1,094
5	- 1,260	1,882	1,134
6	- 1,264	0,858	0
7	2,156	0,212	0,088
8	1,350	1,383	- 0,967
9	1,321	1,366	2,101
10	2,149	2,530	1,050
11	- 0,003	3,452	1,947
12	- 0,010	3,368	0,179
13	- 1,316	1,359	2,104
14	- 2,157	2,522	1,066
15	- 2,153	0,209	0,089
16	- 1,351	1,383	- 0,967
17	- 0,004	- 0,651	0,891
18	0,001	- 0,670	- 0,877

Angles (d°)	
2.1.6	111,70
1.2.3	111,91
2.3.4	111,63
i	47,66
i	47,90
1.6.5	111,96
7.2.1	109,88
7.2.3	109,84
8.2.1	109,32
8.2.3	109,12
17.1.18	106,49
4.5.6	111,36
3.4.5	110,81
moyenne	
C-C-C	111,56
Hax-C-C	109,45
Heq-C-C	109,79
H-C-H	106,68
i	47,78

Dièdres (d°)	
moyenne	
C-C-C-C	54,45
Heq-C-C-Heq	61,66
Hax-C-C-Hax	171,89
Heq-C-C-Hax	55,11

Longueurs de Liaison (Å)	
C-C	1,528
C-H	1,104

Energie (Kcal/mole)	
Wa	0,935
Wb	0,239
Wd	0,348
ΣW	1,522

$\Delta\theta_{2.1.6}$	4"
ΔW	0,002 kcal

Cyclohexane

- chaise

30 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 2

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,266	0,856	0
3	1,254	1,883	1,132
4	- 0,004	2,747	1,078
5	- 1,266	1,886	1,129
6	- 1,266	0,856	0
7	2,153	0,206	0,098
8	1,356	1,378	- 0,968
9	1,302	1,360	2,103
10	2,148	2,526	1,055
11	- 0,005	3,457	1,924
12	- 0,003	3,347	0,152
13	- 1,317	1,366	2,101
14	- 2,157	2,531	1,040
15	- 2,151	0,203	0,097
16	- 1,355	1,376	- 0,970
17	0	- 0,653	0,890
18	0	- 0,660	- 0,885

Angles (d°)	
2.1.6	111,86
1.2.3	111,73
2.3.4	111,13
i	47,78
i	47,61
1.6.5	112,18
7.2.1	109,60
7.2.3	109,61
8.2.1	109,43
8.2.3	109,41
17.1.18	107,06
4.5.6	110,84
3.4.5	111,10
moyenne	
C-C-C	111,47
Hax-C-C	109,45
Heq-C-C	109,57
H-C-H	107,24
i	47,70

Dièdres (d°)	
moyenne	
C-C-C-C	54,69
Heq-C-C-Heq	62,37
Hax-C-C-Hax	172,28
Heq-C-C-Hax	54,95

Longueurs de Liaison (Å)	
C-C	1,528
C-H	1,104

Energie (Kcal/mole)	
Wa	- 6,331
Wb	0,198
Wd	0,352
ΣW	- 5,782

$\Delta\theta_{2.1.6}$	42"
ΔW	0,01 kcal

Cyclohexane

- chaise

30 variables

fonctions

$$C\text{---}C \quad 16600\, e^{-3,63r} - 325/r^6$$
$$C\text{---}H \quad 12900\, e^{-4,12r} - 125/r^6$$
$$H\text{---}H \quad 10000\, e^{-4,60r} - 49,2/r^6$$

FIGURE : 3

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,266	0,855	0
3	1,258	1,885	1,128
4	- 0,002	2,750	1,096
5	- 1,261	1,885	1,129
6	- 1,266	0,855	0
7	2,150	0,202	0,106
8	1,358	1,374	- 0,970
9	1,320	1,365	2,100
10	2,149	2,531	1,042
11	- 0,002	3,433	1,963
12	- 0,002	3,364	0,178
13	- 1,323	1,364	2,100
14	- 2,152	2,530	1,041
15	- 2,150	0,202	0,104
16	- 1,358	1,375	- 0,970
17	0	- 0,655	0,889
18	0	- 0,656	- 0,888

Angles (d°)	
2.1.6	111,96
1.2.3	111,88
2.3.4	111,75
i	47,59
i	47,63
1.6.5	111,96
7.2.1	109,41
7.2.3	109,41
8.2.1	109,38
8.2.3	109,38
17.1.18	107,16
4.5.6	111,63
3.4.5	111,00
moyenne	
C-C-C	111,70
Hax-C-C	109,40
Heq-C-C	109,42
H-C-H	107,40
i	47,61

Dièdres (d°)	
moyenne	
C-C-C-C	54,07
Heq-C-C-Heq	63,29
Hax-C-C-Hax	171,53
Heq-C-C-Hax	54,12

Longueurs de Liaison (Å)	
C-C	1,528
C-H	1,104

Energie (Kcal/mole)	
Wa	0,994
Wb	0,176
Wd	0,433
ΣW	1,603

$\Delta\theta_{2.1.6}$	1"
ΔW	10^{-5} kcal

Cyclohexane

- chaise

30 variables

fonctions

$$C\text{---}C \quad 7000\, e^{-3,2r} - 325/r^6$$
$$C\text{---}H \quad 4012\, e^{-3,4r} - 125/r^6$$
$$H\text{---}H \quad 2300\, e^{-3,6r} - 49,2/r^6$$

FIGURE : 4

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,266	0,855	0
3	1,264	1,844	1,165
4	0	2,703	1,166
5	- 1,264	1,843	1,165
6	- 1,266	0,855	0
17	0	- 0,651	0,892
18	0	- 0,664	- 0,882
7	2,158	0,207	0,059
8	1,333	1,411	- 0,952
9	1,327	1,287	2,116
10	2,157	2,490	1,111
11	0	3,366	2,049
12	0	3,355	0,275
13	- 1,327	1,287	2,116
14	- 2,157	2,490	1,111
15	- 2,158	0,207	0,059
16	- 1,333	1,411	- 0,952

cyclohexane - chaise

fonctions du tableau 8

12 variables

Angles (d°)	
3.4.5	111,59
2.1.6	111,91
1.2.3	111,15
2.3.4	111,44
7.2.1	109,90
8.2.1	109,39
17.1.18	106,92
moyenne	
C-C-C	111,44
H_{ax}-C-C	109,34
H_{eq}-C-C	109,83
H-C-H	106,94
i	49,70

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	0,986
Wb . .	0,208
Wd . .	0,271
ΣW . .	1,464

Δθ	1'
ΔW	10^{-4} kcal

Dièdres (d°)	
moyenne	
C-C-C-C	54,81
H_{eq}-C-C-H_{eq}	61,29
H_{ax}-C-C-H_{ax}	172,83
H_{eq}-C-C-H_{ax}	55,62

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104

FIGURE : 5

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,266	0,855	0
3	1,265	1,868	1,144
4	0	2,726	1,139
5	- 1,265	1,868	1,144
6	- 1,266	0,855	0
17	0	- 0,654	0,889
18	0	- 0,654	- 0,889
7	2,151	0,201	0,090
8	1,348	1,389	- 0,963
9	1,343	1,335	2,107
10	2,150	2,522	1,056
11	0	3,386	2,024
12	0	3,374	0,245
13	- 1,343	1,335	2,107
14	- 2,150	2,522	1,056
15	- 2,151	0,201	0,090
16	- 1,348	1,389	- 0,963

cyclohexane - chaise

fonctions

C--C 16600 $e^{-3,63r}$ $-325/r^6$

C--H 30000 $e^{-4,17r}$ $-140/r^6$

H--H 10000 $e^{-4,6r}$ $-49,2/r^6$

Angles (d°)	
moyenne	
C-C-C	111°46'20" (111,77)
H-C-C	109°23'45" (109,40)
H-C-H	107°22'58" (107,38)
i	47,5

Energie (kcal/mole)	
Wa	- 5,313
Wb	0,161
Wd	3,698
ΣW	- 1,455

$\Delta\theta_{2.1.6}$	3"
ΔW	10^{-5} kcal

Dièdres	
moyenne	
C-C-C-C	53,87
H_a-C-C-H_{eq}	53,65
H_a-C-C-H_a	171,84
H_{eq}-C-C-H_{eq}	64,54

Longueurs de Liaison (Å)	
C-C	1,528
C-H	1,104

FIGURE : 6

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,268	0,852	0
3	1,289	1,872	1,137
4	0,001	1,848	1,958
5	- 1,288	1,872	1,138
6	- 1,268	0,852	0
7	2,154	0,198	0,071
8	1,365	1,373	- 0,968
9	2,153	1,676	1,797
10	1,448	2,884	0,726
11	0,002	0,964	2,619
12	0,001	2,689	2,674
13	- 2,153	1,680	1,797
14	- 1,451	2,884	0,729
15	- 2,156	0,199	0,068
16	- 1,368	1,372	- 0,969
17	0	- 0,670	0,877
18	0	- 0,668	- 0,879

Angles (d°)		
2.1.6	112,21	
1.2.3	112,57	
2.3.4	112,18	
i	48,10	
i'	48,13	
1.6.5	112,52	
7.2.1	109,61	
7.2.3	109,67	
8.2.1	109,61	
8.2.3	109,67	
17.1.2	109,78	
18.1.2	109,72	
17.1.18	105,40	
7.2.8	105,45	
4.5.6	112,24	
3.4.5	(115,02)	
moyenne		
C-C-C	112,34	(112,79)
H_{ax}-C-C	109,68	
H_{eq}-C-C	109,70	
H-C-H	105,36	(105,01)
i		

Dièdres (d°)	
C_6-C_1-C_2-C_3	53,72
C_1-C_2-C_3-C_4	3,14
C_2-C_3-C_4-C_5	48,07
C_3-C_4-C_5-C_6	48,07
C_4-C_5-C_6-C_1	3,17
C_5-C_6-C_1-C_2	53,71
H_{17ax}-C_1-C_2-H_{8ax}	168,99
H_{17ax}-C_1-C_2-H_{7eq}	53,70
H_{18eq}-C_1-C_2-H_{8ax}	53,61
H_{18eq}-C_1-C_2-H_{7eq}	61,68

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	0,142
Wb . . .	0,959
Wd . . .	6,276
ΣW . . .	7,377

$\Delta\theta_{2.1.6}$	40"
ΔW	$2\ 10^{-4}$ kcal

cyclohexane - bateau

30 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4$Å

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4$Å

FIGURE : 7

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,264	0,858	0
3	1,270	1,882	1,134
4	0,001	1,809	1,982
5	- 1,260	1,894	1,124
6	- 1,264	0,858	0
7	2,154	0,210	0,082
8	1,349	1,382	- 0,968
9	2,153	1,722	1,777
10	1,375	2,898	0,714
11	- 0,004	0,865	2,554
12	0,002	2,626	2,724
13	- 2,152	1,752	1,759
14	- 1,347	2,905	0,690
15	- 2,151	0,208	0,100
16	- 1,364	1,367	- 0,974
17	- 0,001	- 0,665	0,881
18	0	- 0,659	- 0,886

Angles (d°)	
2.1.6	111,68
1.2.3	112,28
2.3.4	112,15
i	47,92
i'	47,33
1.6.5	112,24
7.2.1	109,71
7.2.3	109,62
8.2.1	109,27
8.2.3	109,43
17.1.2	109,80
18.1.2	109,57
17.1.18	106,31
7.2.8	106,35
4.5.6	112,20
3.4.5	111,76
moyenne	
C-C-C	112,05
H_{ax}-C-C	109,54
H_{eq}-C-C	109,61
H-C-H	106,32
i	47,62

Dièdres (d°)	
C_6-C_1-C_2-C_3	53,33
C_1-C_2-C_3-C_4	0,65
C_2-C_3-C_4-C_5	52,59
C_3-C_4-C_5-C_6	52,63
C_4-C_5-C_6-C_1	0,58
C_5-C_6-C_1-C_2	52,60
H_{17ax}-C_1-C_2-H_{8ax}	169,73
H_{17ax}-C_1-C_2-H_{7eq}	53,49
H_{18eq}-C_1-C_2-H_{8ax}	53,31
H_{18eq}-C_1-C_2-H_{7eq}	62,92

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	1,989
Wb . . .	0,280
Wd . . .	5,982
ΣW . . .	8,251

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,001kcal

cyclohexane - bateau

30 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 8

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,266	0,856	0
3	1,271	1,884	1,131
4	0,002	1,807	1,978
5	- 1,268	1,882	1,132
6	- 1,266	0,856	0
7	2,152	0,203	0,091
8	1,360	1,375	- 0,970
9	2,154	1,721	1,773
10	1,369	2,897	0,704
11	0,003	0,869	2,560
12	0,002	2,624	2,721
13	- 2,150	1,722	1,775
14	- 1,370	2,897	0,710
15	- 2,152	0,204	0,091
16	- 1,361	1,375	- 0,970
17	0	- 0,660	0,885
18	0	- 0,660	- 0,885

cyclohexane - bateau

30 variables

fonctions :

C---C $7000e^{-3,2r} - 325/r^6$

C---H $4012e^{-3,4r} - 125/r^6$

H---H $2300e^{-3,6r} - 49,2/r^6$

Angles (d°)	
2.1.6	111,87
1.2.3	112,32
2.3.4	111,96
i	47,73
i'	47,79
1.6.5	112,16
7.2.1	109,50
7.2.3	109,51
8.2.1	109,49
8.2.3	109,49
17.1.2	109,57
18.1.2	109,57
17.1.18	106,56
7.2.8	106,35
4.5.6	112,11
3.4.5	112,35
moyenne	
C-C-C	112,13
H_{ax}-C-C	109,52
H_{eq}-C-C	109,56
H-C-H	106,38
i	47,76

Dièdres (d°)	
$C_6-C_1-C_2-C_3$	53,12
$C_1-C_2-C_3-C_4$	0,36
$C_2-C_3-C_4-C_5$	52,51
$C_3-C_4-C_5-C_6$	52,51
$C_4-C_5-C_6-C_1$	0,44
$C_5-C_6-C_1-C_2$	53,11
$H_{17ax}-C_1-C_2-H_{8ax}$	169,53
$H_{17ax}-C_1-C_2-H_{7eq}$	53,29
$H_{18eq}-C_1-C_2-H_{8ax}$	52,96
$H_{18eq}-C_1-C_2-H_{7eq}$	63,28

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	1,996
Wb . . .	0,273
Wd . . .	6,001
ΣW . . .	8,270

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

FIGURE : 9

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,268	0,853	0
3	1,284	1,874	1,137
4	0,001	1,834	1,964
5	- 1,283	1,875	1,136
6	- 1,268	0,853	0
7	2,154	0,199	0,075
8	1,363	1,374	- 0,969
9	2,153	1,687	1,791
10	1,426	2,888	0,723
11	0,001	0,931	2,599
12	0,001	2,664	2,692
13	- 2,154	1,692	1,790
14	- 1,428	2,889	0,725
15	- 2,155	0,201	0,072
16	- 1,367	1,372	- 0,969
17	0	- 0,668	0,879
18	0	- 0,667	- 0,880

cyclohexane - bateau

30 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $12900e^{-4,12r} - 125/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$

Angles (d°)		
2.1.6	112,11	
1.2.3	112,48	
2.3.4	112,07	
i	48,06	
i'	48,05	
1.6.5	112,44	
7.2.1	109,59	
7.2.3	109,65	
8.2.1	109,59	
8.2.3	109,65	
17.1.2	109,76	
18.1.2	109,71	
17.1.18	105,59	
7.2.8	105,65	
4.5.6	112,12	
3.4.5	(114,31)	
moyenne		
C-C-C	112,20	(112,59)
H_{ax}-C-C	109,72	
H_{eq}-C-C	109,69	
H-C-H	105,50	(105,19)
i	48,06	

Dièdres (d°)	
$C_6-C_1-C_2-C_3$	53,61
$C_1-C_2-C_3-C_4$	2,38
$C_2-C_3-C_4-C_5$	49,45
$C_3-C_4-C_5-C_6$	49,46
$C_4-C_5-C_6-C_1$	2,34
$C_5-C_6-C_1-C_2$	53,61
$H_{17ax}-C_1-C_2-H_{8ax}$	169,12
$H_{17ax}-C_1-C_2-H_{7eq}$	53,61
$H_{18eq}-C_1-C_2-H_{8ax}$	53,52
$H_{18eq}-C_1-C_2-H_{7eq}$	61,99

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	
Wb . . .	
Wd . . .	
ΣW . . .	6,704

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	0,003 kcal

FIGURE : 10

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,268	0,853	0
3	1,267	1,863	1,147
4	0	1,762	1,995
5	- 1,267	1,863	1,147
6	- 1,268	0,853	0
17	0	- 0,659	0,886
18	0	- 0,660	- 0,885
7	2,154	0,200	0,082
8	1,350	1,389	- 0,962
9	2,151	1,693	1,786
10	1,355	2,885	0,737
11	0	2,561	2,757
12	0	0,802	2,541
13	- 2,151	1,693	1,786
14	- 1,355	2,885	0,737
15	- 2,154	0,200	0,082
16	- 1,350	1,389	0,962

Angles (d°)	
2.1.6	112,12
1.2.3	111,63
2.3.4	111,92
3.4.5	112,01
17.1.2	109,47
18.1.2	109,51
7.2.1	109,61
8.2.1	109,45
17.1.18	106,62
7.2.8	106,99
i	48,63
moyenne	
C-C-C	111,87
H-C-H	106,90
H_{ax}-C-C	109,55
H_{eq}-C-C	109,50

Dièdres (d°)	
$C_6-C_1-C_2-C_3$	53,82
$C_1-C_2-C_3-C_4$	0,00
$H_{17ax}-C_1-C_2-H_{8ax}$	170,83
$H_{17ax}-C_1-C_2-H_{7eq}$	53,78
$H_{18eq}-C_1-C_2-H_{8ax}$	54,28
$H_{18eq}-C_1-C_2-H_{7eq}$	62,77

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	2,228
Wb . .	0,189
Wd . .	5,911
ΣW . .	8,328

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	4.10^{-4} kcal

cyclohexane - bateau

12 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 11

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,251	0,878	0
3	1,265	1,842	1,185
4	0	2,697	1,247
5	- 1,265	1,842	1,185
6	- 1,251	0,878	0
17	0	- 0,660	0,885
18	0	- 1,147	- 1,539
7	2,160	0,252	0,002
8	1,329	1,435	- 0,950
9	1,399	1,287	2,130
10	2,161	2,486	1,145
11	0	3,304	2,169
12	0	3,426	0,418
13	- 1,399	1,287	2,130
14	- 2,161	2,486	1,145
15	- 2,160	0,252	0,002
16	- 1,329	1,435	0,950

Angles (d°)	
2.1.6	109,86
1.2.3	111,73
2.3.4	112,12
3.4.5	111,76
17.1.2	110,08
11.4.3	109,96
7.2.1	110,40
9.3.2	110,35
8.2.1	110,37
10.3.2	110,32
18.1.2	110,09
12.4.3	109,83

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - Me	1,920

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	0,688
Wb . . .	6,770
Wd . . .	3,752
ΣW . . .	11,211

$\Delta\theta_{2.1.6}$	21'
ΔW_{kcal}	0,01

méthyl$_{eq}$-cyclohexane

12 variables

fonctions:

C...C $\quad 7\,000\ e^{-3,2r} - 325/r^6$

C...H $\quad 4\,012\ e^{-3,4r} - 125/r^6$

H...H $\quad 2\,300\ e^{-3,6r} - 49,2/r^6$

C...Me $\quad -2,25.\ 0,187\ (3,85/r)^6 + 8,28.\ 10^5.\ 0,187\ e^{-r/(0,0736.3,85)}$

H...Me $\quad -2,25.\ 0,117\ (3,5/r)^6 + 8,28.\ 10^5.\ 0,117\ e^{-r/(0,0736.3,5)}$

FIGURE : 12

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,259	0,866	0
3	1,267	1,868	1,154
4	0	2,721	1,185
5	-1,267	1,868	1,154
6	-1,259	0,866	0
17	0	-0,643	0,898
18	0	-1,346	-1,368
7	2,173	0,246	-0,001
8	1,385	1,379	-0,969
9	1,423	1,356	2,119
10	2,174	2,497	1,131
11	0	3,408	2,049
12	0	3,458	0,363
13	-1,423	1,356	2,119
14	-2,174	2,497	1,131
15	-2,173	0,246	-0,001
16	-1,385	1,379	-0,969

Angles (d°)	
2.1.6	110,96
1.2.3	112,09
2.3.4	112,14
3.4.5	112,08
17.1.2	109,26
11.4.3	111,32
7.2.1	111,34
9.3.2	110,94
8.2.1	110,95
10.3.2	111,30
18.1.2	113,42
12.4.3	110,94

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - Me	1,920

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	- 2,152
Wb . . .	0,570
Wd . . .	3,873
ΣW . . .	2,291

$\Delta\theta_{2.1.6}$	7'
ΔW	0,01 kcal

méthyl$_{eq}$-cyclohexane

12 variables

fonctions :

C...C $16\,600\ e^{-3,63r} - 325/r^6$

C...H $30\,000\ e^{-4,17r} - 140/r^6$

H...H $10\,000\ e^{-4,6r} - 49,2/r^6$

C...Me $0,1\ e^{3,76(3,25-r)}$

H...Me $0,1\ e^{4,13(3,5-r)}$

FIGURE : 13

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,260	0,865	0
3	1,268	1,868	1,153
4	0	2,719	1,184
5	-1,268	1,868	1,153
6	-1,260	0,865	0
17	0	-0,651	0,892
18	0	-1,343	-1,372
7	2,173	0,245	-0,001
8	1,389	1,376	-0,970
9	1,427	1,358	2,119
10	2,174	2,498	1,128
11	0	3,409	2,046
12	0	3,456	0,362
13	-1,427	1,358	2,119
14	-2,174	2,498	1,128
15	-2,173	0,245	-0,001
16	-1,389	1,376	-0,970

Angles (d°)	
2.1.6	111,07
1.2.3	112,09
2.3.4	112,12
3.4.5	112,21
17.1.2	109,50
11.4.3	111,35
7.2.1	111,37
9.3.2	111,01
8.2.1	111,00
10.3.2	111,28
18.1.2	113,32
12.4.3	110,90

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - Me	1,920

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	-2,623
Wb . . .	0,559
Wd . . .	3,886
ΣW . . .	1,822

$\Delta\theta_{2.1.6}$	7'
ΔW	0,01 kcal

méthyl (eq)-cyclohexane

12 variables

fonctions :

C...C $16600\ e^{-3,63\ r} - 325/r^6$

C...H $30000\ e^{-4,17\ r} - 140/r^6$

H...H $10000\ e^{-4,6\ r} - 49,2/r^6$

H...Me $0,1\ e^{4,13(3,5-r)}$

C...Me $-2,25.\sqrt{0,65.0,326}.\ (3,25/r)^6 + 8,28.10^5.\ \sqrt{0,65.0,326}.\ e^{-r/(0,0736.3,25)}$

FIGURE : 14

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,256	0,871	0
3	1,269	1,864	1,161
4	0	2,713	1,220
5	-1,269	1,864	1,161
6	-1,256	0,871	0
17	0	-0,699	0,854
18	0	-1,242	-1,463
7	2,169	0,251	-0,004
8	1,380	1,389	-0,967
9	1,443	1,347	2,121
10	2,170	2,500	1,128
11	0	3,365	2,111
12	0	3,472	0,419
13	-1,443	1,347	2,121
14	-2,170	2,500	1,128
15	-2,169	0,251	-0,004
16	-1,380	1,389	-0,967

Angles (d°)	
2.1.6	110,50
1.2.3	112,18
2.3.4	112,53
3.4.5	112,29
17.1.2	111,16
11.4.3	111,06
7.2.1	111,12
9.3.2	110,98
8.2.1	111,10
10.3.2	111,01
18.1.2	111,64
12.4.3	110,75

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - Me	1,920

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	-4,780
Wb . . .	0,523
Wd . . .	3,950
ΣW . . .	-0,297

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	0,04 kcal

méthyl(eq)-cyclohexane

12 variables

fonctions :

C...C 16600 $e^{-3,63\ r} - 325/r^6$

C...H 30000 $e^{-4,17\ r} - 140/r^6$

H...H 10000 $e^{-4,6\ r} - 49,2/r^6$

H...Me $-2,25.\ 0,187(3,25/r)^6 + 8,28.\ 10^5.\ 0,187\ e^{-r/(0,0736.3,25)}$

C...Me $-2,25.\ 0,117(3,5/r)^6 + 8,28.10^5.\ 0,117\ e^{-r/(0,0736.3,5)}$

FIGURE : 15

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,254	0,873	0
3	1,268	1,857	1,169
4	0	2,707	1,234
5	-1,268	1,857	1,169
6	-1,254	0,873	0
17	0	-0,692	0,860
18	0	-1,217	-1,485
7	2,168	0,255	-0,010
8	1,370	1,400	-0,963
9	1,441	1,332	2,125
10	2,169	2,495	1,137
11	0	3,342	2,137
12	0	3,464	0,431
13	-1,441	1,332	2,125
14	-2,169	2,495	1,137
15	-2,168	0,255	-0,010
16	-1,370	1,400	-0,963

Angles (d°)	
2.1.6	110,28
1.2.3	112,08
2.3.4	112,51
3.4.5	112,21
17.1.2	110,99
11.4.3	110,77
7.2.1	111,09
9.3.2	110,94
8.2.1	111,04
10.3.2	110,94
18.1.2	111,24
12.4.3	110,50

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - Me	1,920

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	-4,694
Wb . . .	0,932
Wd . . .	3,914
ΣW . . .	0,152

$\Delta\theta_{2.1.6}$	5"
ΔW	0,004 kcal

méthyl (eq)-cyclohexane

12 variables

fonctions :

C...C 16600 $e^{-3,63\ r} - 325/r^6$

C...H 30000 $e^{-4,17\ r} - 140/r^6$

H...H 10000 $e^{-4,6\ r} - 49,2/r^6$

C...Me $-2,25.0,187(3,85/r)^6 + 8,28.10^5.0,187\ e^{-r/(0,0736.3,85)}$

H...Me $-2,25.0,117(3,5/r)^6 + 8,28.10^5.0,117\ e^{-r/(0,0736.3,5)}$

FIGURE : 16

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,260	0,865	0
3	1,267	1,870	1,151
4	0	2,723	1,180
5	- 1,267	1,870	1,151
6	- 1,260	0,865	0
17	0	- 0,640	0,900
18	0	- 1,351	- 1,364
7	2,172	0,244	0,004
8	1,390	1,374	- 0,971
9	1,422	1,361	2,118
10	2,174	2,499	1,129
11	0	3,413	2,041
12	0	3,458	0,356
13	- 1,422	1,361	2,118
14	- 2,174	2,499	1,129
15	- 2,172	0,244	0,004
16	- 1,390	1,374	- 0,971

Angles (d°)	
2.1.6	111,06
1.2.3	112,10
2.3.4	112,14
3.4.5	112,09
17.1.2	109,15
18.1.2	113,46
7.2.3	111,29
8.2.3	110,98
9.3.4	110,93
10.3.4	111,32
11.4.5	111,31
12.4.5	110,96

Dièdres (d°)	
$C_6-C_1-C_2-C_3$	54,39

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 2,121
Wb . .	0,574
Wd . .	3,877
ΣW . .	2,330

Δθ	20"
ΔW	10^{-4} kcal

méthyl (eq) - cyclohexane

12 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$

C---Me $0,11e^{3,76(3,85-r)}$

H---Me $0,1e^{4,13(3,50-r)}$

FIGURE : 17

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,257	0,869	0
3	1,261	1,853	1,170
4	0	2,716	1,171
5	- 1,261	1,853	1,170
6	- 1,257	0,869	0
17	0	- 0,585	0,936
18	0	- 1,272	- 1,438
7	2,153	0,227	0,052
8	1,316	1,429	- 0,950
9	1,325	1,294	2,120
10	2,156	2,497	1,114
11	0	3,377	2,055
12	0	3,369	0,281
13	- 1,325	1,294	2,120
14	- 2,156	2,497	1,114
15	- 2,153	0,227	0,052
16	- 1,316	1,429	- 0,950

Angles (d°)	
2.1.6	110,64
1.2.3	111,60
2.3.4	111,22
3.4.5	111,18
17.1.2	107,53
11.4.3	109,81
7.2.1	109,65
9.3.2	109,46
8.2.1	109,41
10.3.2	109,82
18.1.2	112,14
12.4.3	109,47
17.1.18	106,52
7.2.8	106,96
9.3.10	106,93
11.4.12	106,97
i	49,95

Dièdres (d°)	
17.1.2.3	61,76
17.1.2.8	176,99
17.1.2.7	59,96
6.1.2.3	55,42
6.1.2.8	65,83
6.1.2.7	177,14
18.1.2.3	178,55
18.1.2.8	60,20
18.1.2.7	56,83
7.2.3.9	56,17
7.2.3.4	177,26
7.2.3.10	60,95
1.2.3.9	65,54
1.2.3.4	55,55
1.2.3.10	177,33
8.2.3.9	173,20
8.2.3.4	65,71
8.2.3.10	56,09
9.3.4.5	65,99
9.3.4.12	172,92
9.3.4.11	55,76
2.3.4.5	55,10
2.3.4.12	65,98
2.3.4.11	176,84
10.3.4.5	176,89
10.3.4.12	55,81
10.3.4.11	61,36

Energie (Kcal/mole)	
Wa . . .	3,778
Wb . . .	0,557
Wd . . .	0,197
ΣW . . .	4,532

$\Delta\theta_{2.1.6}$	40"
ΔW	$2\ 10^{-4}$ kcal

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - M_e	1,920

méthyl (eq) cyclohexane

12 variables

fonctions du tableau 8
à l'exception de :

C---Me $0,11e^{3,76(3,85-r)}$

FIGURE : 18

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,260	0,865	0
3	1,267	1,870	1,151
4	0	2,723	1,179
5	-1,267	1,870	1,151
6	-1,260	0,865	0
17	0	-0,640	0,900
18	0	-1,350	-1,365
7	2,173	0,244	0,039
8	1,389	1,375	-0,971
9	1,421	1,360	2,118
10	2,174	2,499	1,128
11	0	3,414	2,040
12	0	3,457	0,354
13	-1,421	1,360	2,118
14	-2,174	2,499	1,128
15	-2,173	0,244	0,039
16	-1,389	1,375	-0,971

Angles (d°)	
2.1.6	111,06
1.2.3	112,10
2.3.4	112,14
3.4.5	112,07
17.1.2	109,15
11.4.3	111,31
7.2.1	111,30
9.3.2	110,91
8.2.1	110,96
10.3.2	111,31
18.1.2	113,44
12.4.3	110,94

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - Me	1,920

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	-2,122
Wb . . .	0,575
Wd . . .	3,874
ΣW . . .	2,327

$\Delta\theta_{2.1.6}$	7'
ΔW	0,003 kcal

méthyl (eq)-cyclohexane

12 variables

fonctions :

C...C $16600\ e^{-3,63\ r} - 325/r^6$

C...H $30000\ e^{-4,17\ r} - 140/r^6$

H...H $10000\ e^{-4,6\ r} - 49,2/r^6$

C...Me $0,1\ e^{3,76(3,85-r)}$

H...Me $0,1\ e^{4,13(3,5-r)}$

FIGURE : 19

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,260	0,865	0
3	1,257	1,853	1,166
4	- 0,001	2,719	1,159
5	- 1,268	1,865	1,155
6	- 1,260	0,865	0
7	2,164	0,235	0,067
8	1,333	1,435	- 0,943
9	1,318	1,287	2,112
10	2,155	2,495	1,137
11	0	3,387	2,038
12	0,101	3,364	0,262
13	- 1,345	1,315	2,109
14	- 2,158	2,515	1,084
15	- 2,162	0,232	0,066
16	- 1,329	1,430	- 0,946
17	0	- 0,608	0,92
18	0	- 1,209	- 1,492

méthyl (eq) cyclohexane

30 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	111,03	12.4.5	109,43
1.2.3	111,40	13.5.4	109,50
2.3.4	111,37	13.5.6	109,12
3.4.5	111,46	14.5.4	109,85
4.5.6	111,29	14.5.6	109,93
5.6.1	112,04	15.6.5	108,99
i	49,73	15.6.1	110,43
i'	49,11	16.6.5	108,20
7.2.1	110,60	16.6.1	110,00
7.2.3	108,89	17.1.18	107,57
8.2.1	110,32	7.2.8	106,96
8.2.3	108,54	9.3.10	106,04
9.3.2	108,79	11.4.12	107,11
9.3.4	110,00	13.5.14	107,05
10.3.2	110,76	15.6.16	107,03
10.3.4	110,00	17.1.6	108,17
11.4.3	109,78	17.1.2	108,16
11.4.5	109,92	18.1.6	110,89
12.4.3	109,04	18.1.2	110,87

Dièdres (d°)	
6.1.2.3	55,03
6/1/2/7	176,28
6.1.2.8	65,59
17.1.2.3	63,51
17.1.2.7	57,74
17.1.2.8	175,87
18.1.2.3	178,78
18.1.2.7	59,97
18.1.2.8	58,15
1.2.3.4	55,53
1.2.3.9	65,71
1.2.3.10	178,12
7.2.3.4	177,78
7.2.3.9	56,54
7.2.3.10	59,64
8.2.3.4	66,13
8.2.3.9	172,63
8.2.3.10	56,46
2.3.4.5	55,14
2.3.4.11	177,17
2.3.4.12	65,78
9.3.4.5	65,47
9.3.4.11	56,55
9.3.4.12	173,61
10.3.4.5	178,24
10.3.4.11	59,73
10.3.4.12	57,32

Energie (Kcal/mole)	
Wa . . .	3,859
Wb . . .	0,570
Wd . . .	0,223
ΣW . . .	4,651

$\Delta\theta_{2.1.6}$	10"
ΔW	10^{-4} kcal

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - M_e	1,920

FIGURE : 20

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,266	0,856	0
3	1,258	1,882	1,132
4	- 0,003	2,744	1,095
5	- 1,265	1,882	1,132
6	- 1,266	0,856	0
7	2,163	0,221	0,098
8	1,359	1,394	- 0,960
9	1,329	1,359	2,101
10	2,154	2,522	1,054
11	- 0,003	3,448	1,945
12	- 0,001	3,357	0,177
13	- 1,321	1,360	2,102
14	- 2,163	2,521	1,056
15	- 2,162	0,218	0,089
16	- 1,351	1,398	- 0,958
17	- 0,001	0,606	0,923
18	0,001	- 1,223	- 1,480

méthyl (eq) cyclohexane

30 variables

fonctions du tableau 8
à l'exception de :

C---Me $0,11e^{3,76\ (3,85\ -\ r)}$

Angles (d°)			
2.1.6	111,85	12.4.5	109,60
1.2.3	111,84	13.5.4	109,29
2.3.4	111,40	13.5.6	109,45
3.4.5	112,10	14.5.4	110,09
4.5.6	111,30	14.5.6	109,72
5.6.1	111,15	15.6.5	109,20
i	47,80	15.6.1	110,39
i'	47,78	16.6.5	108,23
7.2.1	110,56	16.6.1	109,98
7.2.3	108,96	17.1.18	107,12
8.2.1	110,05	7.2.8	106,76
8.2.3	108,52	9.3.10	106,54
9.3.2	109,36	11.4.12	106,64
9.3.4	110,00	13.5.14	107,05
10.3.2	109,40	15.6.16	106,93
10.3.4	110,00	17.1.6	107,87
11.4.3	109,89	17.1.2	107,96
11.4.5	109,94	18.1.6	110,93
12.4.3	109,37	18.1.2	110,90

Energie (Kcal/mole)	
Wa . . .	3,853
Wb . . .	0,566
Wd . . .	0,284
ΣW . . .	4,703

$\Delta\theta_{2.1.6}$	4'
ΔW	0,008 kcal

Dièdres (d°)	
6.1.2.3	52,95
6/1/2/7	174,57
6.1.2.8	67,74
17.1.2.3	65,57
17.1.2.7	56,04
17.1.2.8	173,73
18.1.2.3	177,36
18.1.2.7	61,02
18.1.2.8	56,67
1.2.3.4	54,36
1.2.3.9	67,46
1.2.3.10	176,21
7.2.3.4	176,90
7.2.3.9	55,07
7.2.3.10	61,26
8.2.3.4	67,22
8.2.3.9	170,96
8.2.3.10	54,62
2.3.4.5	55,71
2.3.4.11	177,73
2.3.4.12	65,54
9.3.4.5	65,73
9.3.4.11	56,29
9.3.4.12	173,03
10.3.4.5	177,20
10.3.4.11	60,78
10.3.4.12	55,96

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - M_e	1,920

FIGURE : 21

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,269	0,852	0
3	1,259	1,878	1,132
4	0,002	2,746	1,095
5	- 1,268	1,897	1,114
6	- 1,269	0,852	0
7	2,176	0,225	0,052
8	1,324	1,395	- 0,959
9	1,342	1,375	2,111
10	2,155	2,519	1,055
11	- 0,001	3,448	1,947
12	0,015	3,358	0,176
13	- 1,358	1,408	2,100
14	- 2,150	2,554	1,010
15	- 2,158	0,205	0,100
16	- 1,377	1,366	- 0,971
17	0,005	- 1,285	1,427
18	- 0,004	- 0,630	- 0,907

méthyl (ax) cyclohexane

30 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	112,25	12.4.5	109,14
1.2.3	111,67	13.5.4	108,99
2.3.4	111,62	13.5.6	110,33
3.4.5	47,81	14.5.4	109,42
4.5.6	46,81	14.5.6	109,75
5.6.1	112,41	15.6.5	109,56
i	111,60	15.6.1	110,02
i'	111,78	16.6.5	108,81
7.2.1	111,45	16.6.1	110,01
7.2.3	110,57	17.1.18	103,22
8.2.1	108,42	7.2.8	106,26
8.2.3	108,25	9.3.10	105,42
9.3.2	110,53	11.4.12	106,83
9.3.4	110,02	13.5.14	106,42
10.3.2	109,47	15.6.16	105,89
10.3.4	109,60	17.1.6	112,03
11.4.3	110,19	17.1.2	111,77
11.4.5	109,92	18.1.6	108,34
12.4.3	109,04	18.1.2	108,72

Energie (Kcal/mole)	
Wa . . .	4,906
Wb . . .	0,955
Wd . . .	0,615
ΣW . . .	6,476

$\Delta\theta_{2.1.6}$	3'
ΔW	0,003 kcal

Dièdres (d°)	
6.1.2.3	52,87
6/1/2/7	177,08
6.1.2.8	66,31
17.1.2.3	73,99
17.1.2.7	50,22
17.1.2.8	166,83
18.1.2.3	172,71
18.1.2.7	63,07
18.1.2.8	53,53
1.2.3.4	54,45
1.2.3.9	68,33
1.2.3.10	175,98
7.2.3.4	179,16
7.2.3.9	56,38
7.2.3.10	59,32
8.2.3.4	64,82
8.2.3.9	172,40
8.2.3.10	56,70
2.3.4.5	55,14
2.3.4.11	177,55
2.3.4.12	65,51
9.3.4.5	67,94
9.3.4.11	54,47
9.3.4.12	171,42
10.3.4.5	176,59
10.3.4.11	61,00
10.3.4.12	55,94

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - M_e	1,920

FIGURE : 22

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,267	0,853	0
3	1,256	1,887	1,126
4	- 0,008	2,744	1,099
5	- 1,267	1,879	1,132
6	- 1,267	0,853	0
7	2,173	0,225	0,067
8	1,337	1,386	- 0,964
9	1,349	1,381	2,103
10	2,150	2,528	1,039
11	- 0,008	3,445	1,952
12	- 0,009	3,353	0,178
13	- 1,351	1,378	2,113
14	- 2,158	2,525	1,044
15	- 2,168	0,218	0,070
16	- 1,336	1,385	- 0,965
17	0,001	- 1,262	1,447
18	- 0,004	- 0,601	- 0,926

Angles (d°)			
2.1.6	112,09	12.4.5	109,24
1.2.3	111,81	13.5.4	109,80
2.3.4	111,90	13.5.6	110,68
3.4.5	111,32	14.5.4	109,41
4.5.6	47,45	14.5.6	109,47
5.6.1	47,83	15.6.5	109,87
i	111,35	15.6.1	110,74
i'	112,02	16.6.5	108,94
7.2.1	111,24	16.6.1	108,96
7.2.3	110,24	17.1.18	105,94
8.2.1	108,79	7.2.8	106,03
8.2.3	108,52	9.3.10	105,50
9.3.2	110,00	11.4.12	107,13
9.3.4	110,02	13.5.14	105,98
10.3.2	109,20	15.6.16	106,34
10.3.4	110,05	17.1.6	111,55
11.4.3	110,03	17.1.2	111,52
11.4.5	110,06	18.1.6	107,51
12.4.3	108,95	18.1.2	107,89

Dièdres (d°)	
6.1.2.3	52,52
6/1/2/7	176,25
6.1.2.8	67,32
17.1.2.3	73,36
17.1.2.7	50,37
17.1.2.8	166,80
18.1.2.3	170,70
18.1.2.7	65,57
18.1.2.8	50,86
1.2.3.4	53,60
1.2.3.9	69,00
1.2.3.10	175,67
7.2.3.4	177,89
7.2.3.9	55,29
7.2.3.10	60,04
8.2.3.4	66,40
8.2.3.9	171,01
8.2.3.10	55,67
2.3.4.5	54,96
2.3.4.11	177,26
2.3.4.12	65,57
9.3.4.5	67,62
9.3.4.11	54,67
9.3.4.12	171,85
10.3.4.5	176,56
10.3.4.11	61,15
10.3.4.12	56,02

Energie (Kcal/mole)	
Wa . . .	5,298
Wb . . .	0,801
Wd . . .	0,540
ΣW . . .	6,639

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	0,01 kcal

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - M_e	1,920

méthyl (ax) cyclohexane

30 variables

fonctions du tableau 8
à l'exception de :

C---Me $0,11e^{3,76\ (3,85\ -\ r)}$

FIGURE : 23

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,253	0,874	0
3	1,265	1,913	1,121
4	0	2,769	1,090
5	- 1,265	1,913	1,121
6	- 1,253	0,874	0
17	0	- 1,313	1,400
18	0	- 0,567	- 0,947
7	2,162	0,250	0,040
8	1,298	1,410	- 0,964
9	1,354	1,409	2,099
10	2,154	2,559	1,018
11	0	3,471	1,943
12	0	3,377	0,169
13	- 1,354	1,409	2,099
14	- 2,154	2,559	1,018
15	- 2,162	0,250	0,040
16	- 1,298	1,410	- 0,964

Angles (d°)	
2.1.6	110,18
1.2.3	113,28
2.3.4	111,08
3.4.5	111,76
17.1.2	113,04
11.4.3	109,92
7.2.1	110,58
9.3.2	109,91
8.2.1	108,11
10.3.2	109,64
18.1.2	107,10
12.4.3	109,00
17.1.18	105,92
7.2.8	105,85
9.3.10	106,55
11.4.12	107,11
i	47,18

Dièdres (d°)	
17.1.2.3	74,55
17.1.2.8	165,67
17.1.2.7	50,22
6.1.2.3	53,01
6.1.2.8	66,77
6.1.2.7	177,78
18.1.2.3	169,17
18.1.2.8	49,39
18.1.2.7	66,06
7.2.3.9	57,21
7.2.3.4	179,07
7.2.3.10	59,60
1.2.3.9	67,56
1.2.3.4	54,29
1.2.3.10	175,63
8.2.3.9	172,65
8.2.3.4	65,49
8.2.3.10	55,85
9.3.4.5	67,58
9.3.4.12	171,87
9.3.4.11	54,76
2.3.4.5	54,28
2.3.4.12	66,27
2.3.4.11	176,62
10.3.4.5	175,62
10.3.4.12	55,07
10.3.4.11	62,04

Energie (Kcal/mole)	
Wa . . .	4,580
Wb . . .	1,148
Wd . . .	0,574
ΣW . . .	6,302

$\Delta\theta_{2.1.6}$	40"
ΔW	$6\ 10^{-4}$ kcal

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - M_e	1,920

méthyl (ax) cyclohexane

12 variables

fonctions du tableau 8
à l'exception de :

C---Me $0,11e^{3,76(3,85-r)}$

FIGURE : 24

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,260	0,864	0
3	1,269	1,916	1,109
4	0	2,767	1,107
5	- 1,269	1,916	1,109
6	- 1,260	0,864	0
17	0	- 1,359	1,355
18	0	- 0,633	- 0,905
7	2,177	0,250	0,013
8	1,387	1,349	- 0,984
9	1,441	1,455	2,097
10	2,170	2,550	1,044
11	0	3,487	1,943
12	0	3,473	0,258
13	- 1,441	1,455	2,097
14	- 2,170	2,550	1,044
15	- 2,177	0,250	0,013
16	- 1,387	1,349	- 0,984

Angles (d°)	
2.1.6	111,08
1.2.3	113,22
2.3.4	112,17
3.4.5	112,32
17.1.2	113,62
11.4.3	111,26
7.2.1	111,70
9.3.2	111,28
8.2.1	110,08
10.3.2	110,98
18.1.2	108,92
12.4.3	110,90

Longueurs de Liaison (Å)	
C-C	1,528
C-H	1,104
C-Me	1,920

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,003 kcal

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 1,820
Wb . .	0,653
Wd . .	4,087
ΣW . .	2,924

méthyl (ax) - cyclohexane

12 variables

fonctions C--C $16600\ e^{-3,63r} - 325/r^6$

C--H $30000\ e^{-4,17r} - 140/r^6$

H--H $10000\ e^{-4,6r} - 49,2/r^6$

C--Me $0,1\ e^{3,76\ (3,85-r)}$

H--Me $0,1\ e^{4,13\ (3,5-r)}$

FIGURE : 25

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,260	0,864	0
3	1,269	1,916	1,108
4	0	2,767	1,104
5	- 1,269	1,916	1,108
6	- 1,260	0,864	0
17	0	- 1,360	1,355
18	0	- 0,633	- 0,905
7	2,177	0,249	0,014
8	1,387	1,349	- 0,984
9	1,439	1,455	2,097
10	2,171	2,550	1,044
11	0	3,488	1,940
12	0	3,470	0,253
13	- 1,439	1,455	2,097
14	- 2,171	2,550	1,044
15	- 2,177	0,249	0,014
16	- 1,387	1,349	- 0,984

Angles (d°)	
2.1.6	111,09
1.2.3	113,22
2.3.4	112,13
3.4.5	112,30
17.1.2	113,62
18.1.2	108,92
7.2.3	111,67
8.2.3	110,07
9.3.4	111,27
10.3.4	110,98
11.4.5	111,21
12.4.5	110,87

Dièdres (d°)	
$C_6-C_1-C_2-C_3$	52,11

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 0,885
Wb . .	0,656
Wd . .	4,078
ΣW . .	3,850

méthyl (ax) - cyclohexane

12 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$

C---Me $0,11e^{3,76(3,85-r)}$

H---Me $0,1e^{4,13(3,5-r)}$

FIGURE : 26

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,259	0,865	0
3	1,270	1,900	1,124
4	0	2,751	1,133
5	- 1,270	1,900	1,124
6	- 1,259	0,865	0
17	0	- 1,346	1,369
18	0	- 0,646	- 0,896
7	2,178	0,253	- 0,001
8	1,380	1,363	- 0,978
9	1,442	1,426	2,106
10	2,172	2,535	1,071
11	0	3,464	1,975
12	0	3,463	0,290
13	- 1,442	1,426	2,106
14	- 2,172	2,535	1,071
15	- 2,178	0,253	- 0,001
16	- 1,380	1,363	- 0,978

méthyl (ax) - cyclohexane

12 variables

fonctions C--C $16600\ e^{-3,63r} - 325/r^6$

C--H $30000\ e^{-4,17r} - 140/r^6$

H--H $10000\ e^{-4,6r} - 49,2/r^6$

C--Me $0,1\ e^{3,76\ (3,25-r)}$

H--Me $0,1\ e^{4,13\ (3,5-r)}$

Angles (d°)	
2.1.6	111,02
1.2.3	112,90
2.3.4	112,06
3.4.5	112,39
17.1.2	113,39
18.1.2	109,34
7.2.1	111,80
8.2.1	110,19
9.3.2	111,34
10.3.2	111,07
11.4.3	111,35
12.4.3	110,78

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 2,470
Wb . .	0,615
Wd . .	4,036
ΣW . .	2,181

Longueurs de Liaison (Å)	
C-C	1,528
C-H	1,104
C-Me	1,920

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	0,002 kcal

FIGURE : 27

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,264	0,858	0
3	1,250	1,894	1,123
4	- 0,008	2,761	1,077
5	- 1,250	1,873	1,142
6	- 1,264	0,858	0
7	2,154	0,211	0,095
8	1,343	1,381	- 0,969
9	1,319	1,381	2,098
10 Me_{eq}	2,834	2,975	1,038
11	- 0,021	3,467	1,926
12	- 0,038	3,349	0,144
13	- 1,273	1,339	2,107
14	- 2,157	2,501	1,095
15	- 2,160	0,219	0,096
16	- 1,361	1,406	- 0,953
17	- 0,002	- 0,611	0,920
18 Me_{eq}	- 0,001	- 1,204	- 1,496

diméthyl-1,3 cyclohexane - chaise

isomère cis

30 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	111,68	13.5.6	109,36
1.2.3	111,89	14.5.4	109,65
2.3.4	111,75	14.5.6	109,81
i	47,30	15.6.5	109,08
i'	48,35	15.6.1	110,25
1.6.5	111,44	16.6.5	108,44
7.2.1	109,72	16.6.1	110,58
7.2.3	109,99	17.1.6	107,98
8.2.1	108,97	17.1.2	108,20
8.2.3	108,95	18.1.6	110,58
9.3.2	109,47	18.1.2	110,65
9.3.4	109,98	17.1.18	107,59
10.3.2	109,97	7.2.8	107,20
10.3.4	111,02	9.3.10	104,43
11.4.3	110,46	11.4.12	107,97
11.4.5	109,22	13.5.14	107,18
12.4.3	110,48	15.6.16	106,93
12.4.5	108,86	6.5.4	111,22
13.5.4	109,55	3.4.5	109,80

Energie (Kcal/mole)	
Wa	7,105
Wb	1,135
Wd	0,226
ΣW	8,465

$\Delta\theta_{2.1.6}$	3'
ΔW	0,0008 kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	52,37	3.4.5.6	57,63
6.1.2.7	174,74	3.4.5.14	179,28
6.1.2.8	68,17	3.4.5.13	63,38
17.1.2.3	66,34	11.4.5.6	178,90
17.1.2.7	56,03	11.4.5.14	59,47
17.1.2.8	173,12	11.4.5.13	57,89
18.1.2.3	176,02	12.4.5.6	63,43
18.1.2.7	61,61	12.4.5.14	58,21
18.1.2.8	55,48	12.4.5.13	175,56
1.2.3.4	54,47	4.5.6.1	56,49
1.2.3.9	67,60	4.5.6.15	178,44
1.2.3.10	178,22	4.5.6.16	65,45
7.2.3.4	176,69	13.5.6.1	64,63
7.2.3.9	54,62	13.5.6.15	57,32
7.2.3.10	59,56	13.5.6.16	173,44
8.2.3.4	66,09	14.5.6.1	178,03
8.2.3.9	171,85	14.5.6.15	60,02
8.2.3.10	57,67	14.5.6.16	56,10
2.3.4.5	56,64	5.6.1.2	53,39
2.3.4.11	177,16	5.6.1.17	65,45
2.3.4.12	63,44	5.6.1.18	177,08
9.3.4.5	65,14	15.6.1.2	174,67
9.3.4.11	55,38	15.6.1.17	55,82
9.3.4.12	174,78	15.6.1.18	61,64
10.3.4.5	179,80	16.6.1.2	67,30
10.3.4.11	59,68	16.6.1.17	173,86
10.3.4.12	59,73	16.6.1.18	56,39

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - Me	1,920

Figure : 28

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,270	0,849	0
3	1,253	1,878	1,130
4	0	2,750	1,064
5	- 1,255	1,881	1,127
6	- 1,270	0,849	0
7	2,154	0,195	0,103
8	1,363	1,370	- 0,969
9	1,285	1,336	2,091
10 Me_{eq}	2,847	2,947	1,114
11	- 0,020	3,469	1,902
12	- 0,018	3,335	0,128
13	- 1,297	1,368	2,104
14	- 2,151	2,521	1,059
15	- 2,160	0,206	0,114
16	- 1,383	1,382	- 0,960
17	- 0,003	- 0,605	0,924
18 Me_{eq}	- 0,001	- 1,233	- 1,472

Angles (d°)			
2.1.6	112,47	13.5.6	109,79
1.2.3	111,38	14.5.4	109,53
2.3.4	111,22	14.5.6	109,76
i	47,68	15.6.5	108,97
i'	47,53	15.6.1	110,28
1.6.5	111,51	16.6.5	108,45
7.2.1	109,62	16.6.1	110,68
7.2.3	109,84	17.1.6	107,60
8.2.1	109,40	17.1.2	107,85
8.2.3	109,43	18.1.6	110,88
9.3.2	108,28	18.1.2	110,92
9.3.4	109,98	17.1.18	106,84
10.3.2	111,05	7.2.8	107,08
10.3.4	111,25	9.3.10	104,84
11.4.3	110,74	11.4.12	107,36
11.4.5	108,92	13.5.14	107,02
12.4.3	110,64	15.6.16	106,81
12.4.5	108,83	6.5.4	111,24
13.5.4	109,40	3.4.5	110,27

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	52,57	3.4.5.6	57,41
6.1.2.7	174,34	3.4.5.14	178,94
6.1.2.8	68,53	3.4.5.13	64,06
17.1.2.3	65,92	11.4.5.6	179,14
17.1.2.7	55,85	11.4.5.14	59,35
17.1.2.8	172,98	11.4.5.13	57,66
18.1.2.3	177,40	12.4.5.6	64,11
18.1.2.7	60,83	12.4.5.14	57,41
18.1.2.8	56,30	12.4.5.13	174,41
1.2.3.4	55,14	4.5.6.1	54,85
1.2.3.9	65,79	4.5.6.15	176,82
1.2.3.10	179,60	4.5.6.16	67,26
7.2.3.4	176,79	13.5.6.1	63,39
7.2.3.9	55,85	13.5.6.15	55,57
7.2.3.10	58,74	13.5.6.16	171,49
8.2.3.4	65,94	14.5.6.1	176,23
8.2.3.9	173,13	14.5.6.15	61,80
8.2.3.10	58,53	14.5.6.16	54,12
2.3.4.5	57,60	5.6.1.2	52,45
2.3.4.11	178,23	5.6.1.17	66,19
2.3.4.12	62,85	5.6.1.18	177,31
9.3.4.5	62,34	15.6.1.2	173,66
9.3.4.11	58,29	15.6.1.17	55,02
9.3.4.12	177,22	15.6.1.18	61,49
10.3.4.5	178,04	16.6.1.2	68,36
10.3.4.11	57,41	16.6.1.17	173,00
10.3.4.12	61,51	16.6.1.18	56,49

diméthyl-1,3 cyclohexane - chaise

isomère cis

30 variables

fonctions du tableau 8 à l'exception de :

C--Me $0,11\ e^{3,76\ (3,85-r)}$

Energie (Kcal/mole)	
Wa	6,811
Wb	1,092
Wd	0,245
ΣW	8,148

$\Delta\theta_{2.1.6}$	5"
ΔW	10^{-5} kcal

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - Me	1,920

Figure : 29

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,268	0,853	0
3	1,245	1,886	1,126
4	- 0,020	2,740	1,062
5	- 1,287	1,888	1,124
6	- 1,268	0,853	0
7	2,168	0,216	0,062
8	1,331	1,363	- 0,977
9	1,317	1,390	2,110
10 Me_{eq}	2,818	2,984	1,061
11	- 0,038	3,470	1,889
12	- 0,037	3,327	0,127
13	- 1,366	1,396	2,109
14	- 2,177	2,534	1,025
15	- 2,170	0,219	0,054
16	- 1,339	1,389	- 0,963
17 Me_{ax}	- 0,001	- 1,247	1,460
18	- 0,002	- 0,605	- 0,923

Angles (d°)			
2.1.6	112,16	13.5.6	110,80
1.2.3	111,40	14.5.4	109,77
2.3.4	111,07	14.5.6	109,94
i	47,46	15.6.5	110,06
i'	47,34	15.6.1	110,95
1.6.5	112,85	16.6.5	108,14
7.2.1	110,79	16.6.1	108,91
7.2.3	111,12	17.1.6	111,24
8.2.1	107,76	17.1.2	111,27
8.2.3	109,90	18.1.6	107,91
9.3.2	110,60	18.1.2	107,73
9.3.4	110,03	17.1.18	106,23
10.3.2	110,47	7.2.8	105,66
10.3.4	110,92	9.3.10	103,53
11.4.3	110,59	11.4.12	106,42
11.4.5	108,98	13.5.14	106,39
12.4.3	110,24	15.6.16	105,62
12.4.5	108,55	6.5.4	109,74
13.5.4	110,16	3.4.5	111,89

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	52,31	3.4.5.6	56,33
6.1.2.7	176,56	3.4.5.14	177,26
6.1.2.8	68,31	3.4.5.13	65,92
17.1.2.3	73,01	11.4.5.6	178,96
17.1.2.7	51,23	11.4.5.14	60,13
17.1.2.8	166,37	11.4.5.13	56,70
18.1.2.3	170,92	12.4.5.6	65,54
18.1.2.7	64,83	12.4.5.14	55,38
18.1.2.8	50,30	12.4.5.13	172,21
1.2.3.4	54,38	4.5.6.1	54,16
1.2.3.9	68,08	4.5.6.15	178,70
1.2.3.10	177,89	4.5.6.16	66,38
7.2.3.4	178,44	13.5.6.1	67,71
7.2.3.9	55,97	13.5.6.15	56,83
7.2.3.10	58,05	13.5.6.16	171,75
8.2.3.4	64,98	14.5.6.1	174,98
8.2.3.9	172,56	14.5.6.15	60,48
8.2.3.10	58,53	14.5.6.16	54,44
2.3.4.5	57,23	5.6.1.2	52,94
2.3.4.11	178,93	5.6.1.17	72,40
2.3.4.12	63,67	5.6.1.18	171,45
9.3.4.5	65,57	15.6.1.2	177,00
9.3.4.11	56,12	15.6.1.17	51,65
9.3.4.12	173,53	15.6.1.18	64,50
10.3.4.5	179,50	16.6.1.2	67,16
10.3.4.11	57,82	16.6.1.17	167,50
10.3.4.12	59,59	16.6.1.18	51,34

diméthyl-1,3 cyclohexane - chaise

isomère trans

30 variables

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	8,266
Wb	1,645
Wd	0,460
ΣW	10,372

$\Delta\theta_{2.1.6}$	3'
ΔW	0,005 kcal

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - Me	1,920

Figure : 30

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,255	0,872	0
3	1,237	1,918	1,114
4	- 0,009	2,794	1,003
5	- 1,273	1,940	1,092
6	- 1,255	0,872	0
7	2,154	0,232	0,038
8	1,294	1,390	- 0,974
9	1,253	1,404	2,090
10 Me_{eq}	2,838	2,977	1,080
11	- 0,028	3,549	1,809
12	- 0,003	3,333	0,040
13	- 1,339	1,473	2,091
14	- 2,168	2,577	0,983
15	- 2,163	0,248	0,073
16	- 1,322	1,378	- 0,979
17 Me_{ax}	0,001	- 1,252	1,456
18	0,002	- 0,593	- 0,931

diméthyl-1,3 cyclohexane - chaise

isomère trans

30 variables

fonction du tableau 8 à l'exception de :

C--Me 0,11 $e^{3,76\ (3,85-r)}$

Angles (d°)			
2.1.6	110,44	13.5.6	110,59
1.2.3	112,40	14.5.4	110,00
2.3.4	110,46	14.5.6	109,99
i	46,78	15.6.5	109,76
i'	45,64	15.6.1	110,67
1.6.5	114,12	16.6.5	108,21
7.2.1	109,77	16.6.1	108,15
7.2.3	112,39	17.1.6	111,85
8.2.1	107,26	17.1.2	111,81
8.2.3	108,78	18.1.6	107,93
9.3.2	109,01	18.1.2	107,76
9.3.4	110,02	17.1.18	106,83
10.3.2	110,81	7.2.8	105,91
10.3.4	111,28	9.3.10	105,12
11.4.3	110,69	11.4.12	107,66
11.4.5	109,01	13.5.14	106,61
12.4.3	109,74	15.6.16	105,53
12.4.5	109,19	6.5.4	109,83
13.5.4	109,76	3.4.5	110,49

Energie (Kcal/mole)	
Wa	8,152
Wb	1,535
Wd	0,430
ΣW	10,118

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2'
ΔW	0,03 kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	52,02	3.4.5.6	57,16
6.1.2.7	177,89	3.4.5.14	178,36
6.1.2.8	67,49	3.4.5.13	64,63
17.1.2.3	73,21	11.4.5.6	179,02
17.1.2.7	52,65	11.4.5.14	59,79
17.1.2.8	167,28	11.4.5.13	57,22
18.1.2.3	169,68	12.4.5.6	63,62
18.1.2.7	64,45	12.4.5.14	57,58
18.1.2.8	50,17	12.4.5.13	174,58
1.2.3.4	56,64	4.5.6.1	54,47
1.2.3.9	64,35	4.5.6.15	179,35
1.2.3.10	179,55	4.5.6.16	65,97
7.2.3.4	178,94	13.5.6.1	66,83
7.2.3.9	60,08	13.5.6.15	58,04
7.2.3.10	55,13	13.5.6.16	172,73
8.2.3.4	61,98	14.5.6.1	175,67
8.2.3.9	177,04	14.5.6.15	59,46
8.2.3.10	61,82	14.5.6.16	55,23
2.3.4.5	58,92	5.6.1.2	51,57
2.3.4.11	179,81	5.6.1.17	73,64
2.3.4.12	61,54	5.6.1.18	169,13
9.3.4.5	61,47	15.6.1.2	175,95
9.3.4.11	59,39	15.6.1.17	50,74
9.3.4.12	178,07	15.6.1.18	66,49
10.3.4.5	177,56	16.6.1.2	68,90
10.3.4.11	56,70	16.6.1.17	165,89
10.3.4.12	61,98	16.6.1.18	48,68

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - Me	1,920

Figure : 31

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,267	0,855	0
3	1,257	1,888	1,126
4	0,001	1,771	1,989
5	- 1,255	1,886	1,127
6	- 1,267	0,855	0
7	2,152	0,204	0,106
8	1,365	1,370	- 0,971
9	2,152	1,749	1,757
10 Me_{ax}	1,357	3,654	0,380
11	0,002	0,798	2,511
12	0,001	2,573	2,749
13	- 2,150	1,754	1,759
14	- 1,314	2,902	0,697
15	- 2,152	0,204	0,104
16	- 1,364	1,374	- 0,969
17	0	- 0,655	0,888
18 Me_{eq}	0	- 1,145	- 1,541

dimethyl-1,3 cyclohexane - bateau

isomère cis

30 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	111,97	13.5.6	109,57
1.2.3	111,90	14.5.4	109,46
2.3.4	111,71	14.5.6	109,47
i	47,45	15.6.5	109,57
i'	47,53	15.6.1	109,57
1.6.5	111,80	16.6.5	109,31
7.2.1	109,57	16.6.1	109,66
7.2.3	109,48	17.1.6	109,40
8.2.1	109,57	17.1.2	109,40
8.2.3	109,47	18.1.6	109,48
9.3.2	109,31	18.1.2	109,48
9.3.4	109,48	17.1.18	106,98
10.3.2	109,61	7.2.8	106,72
10.3.4	109,44	9.3.10	107,17
11.4.3	109,49	11.4.12	108,33
11.4.5	109,49	13.5.14	106,85
12.4.3	109,49	15.6.16	106,80
12.4.5	109,48	6.5.4	111,80
13.5.4	109,57	3.4.5	110,55

Energie (Kcal/mole)	
Wa	13,084
Wb	1,018
Wd	5,867
ΣW	19,969

$\Delta\theta_{2.1.6}$	11'
ΔW	0,1 kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	52,55	3.4.5.6	55,74
6.1.2.7	174,18	3.4.5.14	65,73
6.1.2.8	69,05	3.4.5.13	177,42
17.1.2.3	68,89	11.4.5.6	64,95
17.1.2.7	52,73	11.4.5.14	173,58
17.1.2.8	169,50	11.4.5.13	56,72
18.1.2.3	174,17	12.4.5.6	176,43
18.1.2.7	64,20	12.4.5.14	54,96
18.1.2.8	52,56	12.4.5.13	61,90
1.2.3.4	1,79	4.5.6.1	1,64
1.2.3.9	123,12	4.5.6.15	120,03
1.2.3.10	119,68	4.5.6.16	125,25
7.2.3.4	119,89	13.5.6.1	123,32
7.2.3.9	1,43	13.5.6.15	1,64
7.2.3.10	118,63	13.5.6.16	115,07
8.2.3.4	123,46	14.5.6.1	119,81
8.2.3.9	115,22	14.5.6.15	118,51
8.2.3.10	1,97	14.5.6.16	1,79
2.3.4.5	55,79	5.6.1.2	52,61
2.3.4.11	64,90	5.6.1.17	68,84
2.3.4.12	176,48	5.6.1.18	174,22
9.3.4.5	177,02	15.6.1.2	174,28
9.3.4.11	56,32	15.6.1.17	52,84
9.3.4.12	62,30	15.6.1.18	64,10
10.3.4.5	65,79	16.6.1.2	68,80
10.3.4.11	173,52	16.6.1.17	169,76
10.3.4.12	54,89	16.6.1.18	52,82

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - Me	1,920

Figure : 32

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,258	0,867	0
3	1,282	1,891	1,134
4	0	2,723	1,155
5	- 1,282	1,891	1,134
6	- 1,258	0,867	0
17	0	- 0,690	0,861
18	0	- 0,642	- 0,898
7	2,163	0,235	0,032
8	1,307	1,410	- 0,960
9 (Me)	1,558	1,026	2,825
10 (Me)	2,795	3,052	0,916
11	0	3,391	2,034
12	0	3,444	0,319
13 (Me)	- 1,558	1,026	2,825
14 (Me)	- 2,795	3,052	0,916
15	- 2,163	0,349	0,032
16	- 1,307	1,410	- 0,960

Angles (d°)	
2.1.6	110,84
1.2.3	113,14
2.3.4	111,22
3.4.5	114,02
17.1.2	110,79
11.4.3	109,89
7.2.1	110,46
9.3.2	110,74
8.2.1	108,38
10.3.2	109,47
18.1.2	109,28
12.4.3	110,20
17.1.18	105,71
7.2.8	105,71
9.3.10	105,00
11.4.12	101,96
i	47,93

Dièdres (d°)	
17.1.2.3	69,61
17.1.2.8	170,17
17.1.2.7	54,80
6.1.2.3	53,81
6.1.2.8	66,42
6.1.2.7	178,22
18.1.2.3	174,31
18.1.2.8	54,08
18.1.2.7	61,29
7.2.3.9	53,15
7.2.3.4	176,73
7.2.3.10	62,17
1.2.3.9	71,26
1.2.3.4	52,32
1.2.3.10	173,43
8.2.3.9	168,51
8.2.3.4	67,90
8.2.3.10	53,20
9.3.4.5	72,53
9.3.4.12	162,94
9.3.4.11	51,35
2.3.4.5	51,06
2.3.4.12	73,48
2.3.4.11	174,94
10.3.4.5	172,16
10.3.4.12	47,63
10.3.4.11	63,96

Energie (Kcal/mole)	
Wa . . .	21,785
Wb . . .	4,107
Wd . . .	0,803
ΣW . . .	26,695

Longueurs de Liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - M_e	1,920

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,002kcal

tétraméthyl-1,1,3,3 cyclohexane

12 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 33

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,264	0,858	0
3	1,289	1,886	1,130
4	0	2,705	1,176
5	- 1,289	1,886	1,130
6	- 1,264	0,858	0
17	0	- 0,729	0,829
18	0	- 0,699	- 0,855
7	2,180	0,241	- 0,015
8	1,377	1,365	- 0,974
9	1,650	1,055	2,822
10	2,825	3,029	0,986
11	0	3,375	2,053
12	0	3,480	0,390
13	- 1,650	1,055	2,822
14	- 2,825	3,029	0,986
15	- 2,180	0,241	- 1,015
16	- 1,377	1,365	- 0,974

Angles (d°)	
2.1.6	111,67
1.2.3	113,04
2.3.4	111,64
3.4.5	115,10
17.1.2	111,77
11.4.3	110,43
7.2.1	111,86
9.3.2	111,33
8.2.1	110,00
10.3.2	111,00
18.1.2	110,82
12.4.3	110,77
i	47,71

Dièdres (d°)	
3.2.1.6	48,92
2.1.6.5	50,69
1.6.5.4	53,48

Longueurs de liaison (Å)	
C - C	1,528
C - H	1,104
C - Me	1,920

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	16,061
Wb . .	1,027
Wd . .	4,154
ΣW . .	21,242

$\Delta\theta_{2.1.6}$	4"
ΔW	10^{-4} kcal

tétraméthyl-1,1,3,3 cyclohexane

12 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$

C---Me $0,11e^{-3,76(3,85-r)}$

H---Me $0,1e^{4,13(3,5-r)}$

Me---Me $196,5\ (5,82\ 4,82) \times r^{-4,82}\ 6,0238\ 10^2/4,18$

FIGURE : 34

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,259	0,866	0
3	1,295	1,849	1,169
4	0	2,645	1,326
5	- 1,295	1,849	1,169
6	- 1,259	0,866	0
17	0	- 0,719	0,838
18	0	- 0,706	- 0,849
7	2,176	0,252	- 0,044
8	1,356	1,404	- 0,959
9	1,797	0,984	2,807
10	2,775	3,053	0,959
11	0	3,188	2,287
12	0	3,519	0,651
13	- 1,797	0,984	2,807
14	- 2,775	3,053	0,959
15	- 2,176	0,252	- 0,044
16	- 1,356	1,404	- 0,959

Angles (d°)	
2.1.6	110,96
1.2.3	112,58
2.3.4	113,21
3.4.5	115,83
17.1.2	111,66
11.4.3	110,22
7.2.1	111,65
9.3.2	111,67
8.2.1	110,42
10.3.2	109,75
18.1.2	111,23
12.4.3	110,46
i	48,21

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	0,812
Wb . .	1,488
Wd . .	4,585
ΣW . .	6,905

Longueurs de Liaison (Å)	
C-C	1,528
C-H	1,104
C-Me	1,920

$\Delta\theta_{2.1.6}$	33"
ΔW	0,003 kcal

tétraméthyl-1,1,3,3 cyclohexane

12 variables

fonctions

C--C $16600\ e^{-3,63r} - 325/r^6$

C--H $3000\ e^{-4,17r} - 140/r^6$

H--H $10000\ e^{-4,6r} - 49,2/r^6$

C--Me $-2,25.0,187\ (3,85/r)^6+8,28.10^5.0,187e^{-r/(0,0736.3,85)}$

H--Me $-2,25.0,117\ (3,5/r)^6+8,28.10^5.0,117e^{-r/(0,0736.3,5)}$

Me--Me $-2,25.0,326(4,3/r)^6+8,28.10^5.0,326e^{-r/(0,0736.4,3)}$

FIGURE : 35

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
2	0,771	0	0
1	1,285	1,452	0
8	0,771	2,178	- 1,257
7	- 0,771	2,178	- 1,257
4	- 1,285	1,452	0
3	- 0,771	0	0
5	- 0,771	2,178	1,257
6	0,771	2,178	1,257
9	1,156	- 0,544	0,900
10	1,156	- 0,544	- 0,900
11	2,393	1,452	0
12	1,156	1,670	- 2,178
13	1,156	3,230	- 1,278
14	- 1,156	1,670	- 2,178
15	- 1,156	3,230	- 1,278
16	- 2,393	1,452	0
17	- 1,156	- 0,544	0,900
18	- 1,156	- 0,544	- 0,900
19	- 1,156	1,670	2,178
20	- 1,156	3,230	1,278
21	1,156	1,670	2,178
22	1,156	3,230	1,278

Angles (d°)	
C_1-C_2-C_3	109,47
C_2-C_1-C_6	109,47
H_9-C_2-C_3	110,09
H_9-C_2-C_1	110,07
H-C-H	107,02
H_{11}-C_1-C_2	109,47

Dièdres (d°)	
3.2.1.8	60,00
3.2.1.11	180,00
9.2.1.8	178,87
9.2.1.3	61,14
9.2.1.11	58,86
9.2.3.18	117,76
9.2.3.4	121,12

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	1,502
Wb . .	1,767
Wd . .	8,520
ΣW . .	11,789

Δθ	43"
ΔW	10^{-4} kcal

bicyclo (2.2.2) octane
3 variables (D_3h)
fonctions du tableau 8

FIGURE : 38

Atomes	Coordonnées		
	x	y	z
2	0,771	0	0
1	1,313	1,442	0
8	0,789	2,155	- 1,260
7	- 0,754	2,159	- 1,260
4	- 1,298	1,447	- 0,008
3	- 0,771	0	0
5	- 0,782	2,155	1,267
6	0,761	2,173	1,238
9	1,146	- 0,539	0,908
10	1,146	- 0,539	- 0,907
11	2,432	1,455	0,041
12	1,162	1,637	- 2,166
13	1,168	3,209	- 1,282
14	- 1,132	1,643	- 2,179
15	- 1,126	3,216	- 1,281
16	- 2,417	1,473	0,019
17	- 1,148	- 0,532	0,896
18	- 1,153	- 0,548	- 0,899
19	- 1,137	1,592	2,167
20	- 1,169	3,206	1,285
21	1,160	1,692	2,167
22	1,124	3,233	1,241

Angles (d°)	
moyenne	
C-C-C en 2,3,5,6,7,8	110,07°
C-C-C en 1,4	108,46°
C-C-H	
(H_9-C_2-C_3)	109,68°
(H_9-C_2-C_1)	109,60°
(H_{10}-C_2-C_3)	109,64°
(H_{10}-C_2-C_1)	109,61°
H-C-H	108,13°

Dièdres (d°)	
1.2.3.4	0,29
3.2.1.8	59,53
3.2.1.6	57,98
3.2.1.11	177,78
9.2.1.8	179,75
9.2.1.6	62,75
10.2.1.11	61,47
10.2.1.8	61,23
10.2.1.6	178,74
9.2.3.17	0,33
9.2.3.18	120,85
9.2.3.4	121,17
10.2.3.17	118,55
10.2.3.18	0,65
10.2.3.4	120,42

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	1,633
Wb . . .	1,783
Wd . . .	8,300
ΣW . . .	11,715

$\Delta\theta_{C_1\text{-}C_2\text{-}C_3}$	17"
ΔW	10^{-3} kcal

bicyclo (2.2.2) octane
37 variables
fonctions du tableau 8

FIGURE : 39

Atomes	Coordonnées		
	x	y	z
2	0,772	0	0
1	1,286	1,452	0
8	0,782	2,174	- 1,263
7	- 0,761	2,168	- 1,274
4	- 1,286	1,451	- 0,016
3	- 0,772	0	0
5	- 0,779	2,176	1,261
6	0,764	2,181	1,252
9	1,157	- 0,545	0,899
10	1,158	- 0,545	- 0,899
11	2,406	1,451	0,008
12	1,173	1,672	- 2,170
13	1,164	3,227	- 1,282
14	- 1,138	1,655	- 2,195
15	- 1,150	3,217	- 1,310
16	- 2,406	1,450	- 0,027
17	- 1,153	- 0,529	0,895
18	- 1,157	- 0,555	- 0,893
19	- 1,158	1,634	2,166
20	- 1,169	3,226	1,268
21	1,157	1,688	2,177
22	1,146	3,234	1,271

bicyclo (2.2.2) octane

8 variables (D_3)

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
C-C-C en 2,3,5,6,7,8	109,51
C-C-C en 1,4	109,47
C-C-H	
$H_9-C_2-C_3$	110,15
$H_9-C_2-C_1$	110,08
$H_{10}-C_2-C_3$	110,16
$H_{10}-C_2-C_1$	110,09
$H_{11}-C_1-C_2$	109,47
H-C-H	106,70

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	1,450
Wb . . .	1,694
Wd . . .	8,402
ΣW . . .	11,546

$\Delta\theta_{1.2.3}$	10^{-6}°
ΔW	10^{-4} kcal

Dièdres (d°)	
1.2.3.4	0,60
3.2.1.8	60,45
3.2.1.6	59,54
3.2.1.11	179,55
9.2.1.8	178,31
9.2.1.6	61,70
10.2.1.8	60,82
10.2.1.6	179,19
10.2.1.11	59,18
9.2.3.17	0,63
9.2.3.18	116,95
9.2.3.4	121,85
10.2.3.17	118,19
10.2.3.18	0,63
10.2.3.4	120,58
9.2.3.11	58,31

FIGURE : 40

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,290	0,785	0
3	1,283	1,894	1,0567
4	0,023	2,757	0,948
5	- 1,227	1,879	1,070
6	- 1,290	0,785	0
7	2,126	0,118	0,185
8	1,434	1,227	- 0,980
9	1,322	1,425	2,075
10	2,189	2,539	0,917
11	0,023	3,525	1,765
12	0,015	3,285	- 0,041
13	- 1,250	1,406	2,086
14	- 2,144	2,520	1,007
15	- 2,119	0,117	0,211
16	- 1,431	1,242	- 0,974
17	- 0,003	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	117,38	13.5.4	109,33
1.2.3	111,87	13.5.6	109,30
2.3.4	111,27	14.5.4	109,57
i	43,63	14.5.6	109,62
i'	44,31	15.6.5	109,60
1.6.5	109,63	15.6.1	109,45
7.2.1	109,80	16.6.5	109,33
7.2.3	109,30	16.6.1	109,28
8.2.1	109,01	17.1.6	121,19
8.2.3	109,17	17.1.2	121,44
9.3.2	108,90	7.2.8	107,59
9.3.4	109,13	9.3.10	109,06
10.3.2	109,10	11.4.12	108,67
10.3.4	109,34	13.5.14	105,98
11.4.3	109,55	15.6.16	109,55
11.4.5	109,58	4.5.6	112,82
12.4.3	109,50	3.4.5	110,02
12.4.5	109,50		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	48,03	3.4.5.6	58,54
6.1.2.7	169,57	3.4.5.14	179,05
6.1.2.8	72,80	3.4.5.13	63,29
17.1.2.3	131,97	11.4.5.6	179,05
17.1.2.7	10,43	11.4.5.14	58,54
17.1.2.8	107,19	11.4.5.13	57,21
1.2.3.4	50,92	12.4.5.6	61,85
1.2.3.9	69,41	12.4.5.14	60,57
1.2.3.10	171,64	12.4.5.13	176,31
7.2.3.4	172,75	4.5.6.1	52,45
7.2.3.9	52,42	4.5.6.15	172,60
7.2.3.10	66,53	4.5.6.16	67,32
8.2.3.4	69,82	13.5.6.1	69,41
8.2.3.9	169,85	13.5.6.15	50,74
8.2.3.10	50,91	13.5.6.16	170,82
2.3.4.5	56,69	14.5.6.1	174,85
2.3.4.11	177,21	14.5.6.15	65,00
2.3.4.12	63,71	14.5.6.16	55,08
9.3.4.5	63,51	5.6.1.2	47,87
9.3.4.11	57,01	16.6.1.2	71,93
9.3.4.12	176,10	15.6.1.2	168,11
10.3.4.5	177,28	15.6.1.17	11,89
10.3.4.11	62,21	16.6.1.17	108,07
10.3.4.12	56,88	5.6.1.17	132,13

cyclohexanone

conformation chaise

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	0,597
Wb	0,473
Wd	0,417
ΣW	1,487

$\Delta\theta_{2.1.6}$	5"
ΔW	10^{-4} kcal

FIGURE : 41

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,281	0,799	0
3	1,255	1,879	1,086
4	- 0,002	2,746	0,957
5	- 1,260	1,882	1,083
6	- 1,281	0,799	0
7	2,126	0,137	0,161
8	1,409	1,269	- 0,970
9	1,279	1,396	2,097
10	2,168	2,524	1,005
11	- 0,005	3,532	1,757
12	0	3,274	- 0,032
13	- 1,284	1,401	2,096
14	- 2,175	2,524	0,996
15	- 2,129	0,139	0,155
16	- 1,410	1,267	- 0,970
17	0,002	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	116,12	13.5.4	109,49
1.2.3	111,00	13.5.6	109,58
2.3.4	110,73	14.5.4	109,91
i	45,13	14.5.6	109,82
i'	45,00	15.6.5	109,85
1.6.5	111,25	15.6.1	109,93
7.2.1	109,77	16.6.5	109,22
7.2.3	109,77	16.6.1	109,21
8.2.1	109,20	17.1.6	122,04
8.2.3	109,26	17.1.2	121,84
9.3.2	109,53	7.2.8	107,77
9.3.4	109,73	9.3.10	107,21
10.3.2	109,87	11.4.12	107,48
10.3.4	109,70	13.5.14	107,38
11.4.3	109,80	15.6.16	107,30
11.4.5	109,52	4.5.6	110,60
12.4.3	109,82	3.4.5	110,34
12.4.5	109,84		

Dièdres (d°)	
O=C-C-H_{eq}	9,08 et 8,75
O=C-C-H_{ax}	108,86 et 108,72

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	- 4,155
Wb . . .	0,204
Wd . . .	0,281
ΣW . . .	- 3,670

$\Delta\theta_{2.1.6}$	41"
ΔW	5.10^{-5} kcal

cyclohexanone conformation chaise

27 variables

fonctions :

C--C $16600\ e^{-3,63r} - 325/r^6$

C--H $30000\ e^{-4,17r} - 140/r^6$

H--H $10000\ e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4\text{Å}$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4\text{Å}$

FIGURE : 42

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,278	0,804	0
3	1,264	1,821	1,146
4	0	2,686	1,107
5	- 1,264	1,821	1,146
6	- 1,278	0,804	0
7	2,132	0,142	0,103
8	1,384	1,322	0,947
9	1,306	1,274	2,123
10	2,175	2,470	1,095
11	0	3,395	1,974
12	0	3,307	0,175
13	- 1,306	1,274	2,123
14	- 2,175	2,470	1,095
15	- 2,132	0,142	0,103
16	- 1,384	1,322	- 0,947
17	0	1,225	0

cyclohexanone

conformation chaise

10 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.6	115,69
1.2.3	110,20
2.3.4	111,34
3.4.5	111,17
11.4.3	109,77
7.2.1	109,97
9.3.2	109,15
8.2.1	109,67
10.3.2	110,06
12.4.3	109,52
17.1.2	122,15
7.2.8	107,32
9.3.10	106,99
11.4.12	106,98

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	0,539
Wb . . .	0,166
Wd . . .	0,238
ΣW . . .	0,943

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	5,79
17.1.2.3	127,17
17.1.2.8	112,00
6.1.2.7	174,21
6.1.2.3	52,83
6.1.2.8	68,00
7.2.3.9	54,03
7.2.3.4	174,59
7.2.3.10	63,10
1.2.3.9	67,35
1.2.3.4	53,21
1.2.3.10	175,52
8.2.3.9	171,82
8.2.3.4	67,62
8.2.3.10	54,69
9.3.4.5	64,07
9.3.4.12	174,76
9.3.4.11	57,57
2.3.4.5	56,48
2.3.4.12	64,69
2.3.4.11	178,14
10.3.4.5	178,81
10.3.4.12	56,63
10.3.4.11	59,56

FIGURE : 43

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,280	0,801	0
3	1,271	1,889	1,078
4	0	2,743	1,027
5	- 1,271	1,889	1,078
6	- 1,280	0,801	0
7	2,147	0,157	0,098
8	1,478	1,223	- 0,980
9	1,420	1,448	2,097
10	2,189	2,528	1,016
11	0	3,516	1,837
12	0	3,410	0,128
13	- 1,420	1,448	2,097
14	- 2,189	2,528	1,016
15	- 2,147	0,157	0,098
16	- 1,478	1,223	- 0,980
17	0	- 1,225	0

cyclohexanone

conformation chaise

10 variables

fonctions C--C $16600\ e^{-3,63r} - 325/r^6$

C--H $30000\ e^{-4,17r} - 140/r^6$

H--H $10000\ e^{-4,6r} - 49,2/r^6$

Angles (d°)	
2.1.6	115,93
1.2.3	111,82
2.3.4	112,15
3.4.5	112,14
11.4.3	111,13
7.2.1	111,26
9.3.2	111,09
8.2.1	111,14
10.3.2	111,14
12.4.3	111,03
17.1.2	122,03
7.2.8	108,96
9.3.10	108,91
11.4.12	109,20
i	44,5°

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 3,523
Wb . .	0,470
Wd . .	3,028
ΣW . .	- 0,026

Dièdres (d°)	
O=C-C-Heq	5,59°
O=C-C-Hax	104,44°

$\Delta\theta_{2.1.6}$	1'
ΔW	10^{-5} kcal

FIGURE : 44

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,278	0,805	0
3	1,264	1,820	1,147
4	0	2,685	1,106
5	- 1,264	1,820	1,147
6	- 1,278	0,805	0
7	2,132	0,143	0,101
8	1,376	1,328	- 0,946
9	1,306	1,275	2,124
10	2,172	2,473	1,086
11	0	3,393	1,974
12	0	3,301	0,171
13	- 1,306	1,274	2,124
14	- 2,172	2,473	1,086
15	- 2,132	0,143	0,101
16	- 1,376	1,328	- 0,946
17	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	115,60
1.2.3	110,22
2.3.4	111,21
3.4.5	111,18
11.4.3	109,62
7.2.1	109,96
9.3.2	109,21
8.2.1	109,47
10.3.2	109,78
12.4.3	109,44
17.1.2	122,19
7.2.8	107,69
9.3.10	107,53
11.4.12	107,44

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	5,70
17.1.2.3	127,09
17.1.2.8	112,42
6.1.2.7	174,30
6.1.2.3	52,91
6.1.2.8	67,57
7.2.3.9	54,11
7.2.3.4	174,72
7.2.3.10	63,57
1.2.3.9	67,28
1.2.3.4	53,33
1.2.3.10	175,33
8.2.3.9	172,24
8.2.3.4	67,15
8.2.3.10	54,56
9.3.4.5	63,94
9.3.4.12	175,04
9.3.4.11	57,44
2.3.4.5	56,67
2.3.4.12	64,35
2.3.4.11	178,04
10.3.4.5	178,38
10.3.4.12	57,36
10.3.4.11	60,24

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	- 3,459
Wb . . .	0,147
Wd . . .	0,229
ΣW . . .	- 3,083

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

cyclohexanone

conformation chaise

10 variables

fonctions:

C...C $16\,600\ e^{-3,63r} - 325/r^6$

C...H $30\,000\ e^{-4,17r} - 140/r^6$

H...H $10\,000\ e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $\quad r \geqslant 2,4$ Å

$- 10,162\ r + 24,29$ $\quad r \leqslant 2,4$ Å

FIGURE : 45

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,280	0,801	0
3	1,278	1,910	1,057
4	0,020	1,845	1,928
5	- 1,254	1,888	1,079
6	- 1,280	0,801	0
7	2,133	0,146	0,143
8	1,458	1,221	- 0,984
9	2,192	1,832	1,702
10	1,353	2,914	0,564
11	0,033	0,909	2,544
12	0,026	2,694	2,660
13	- 2,152	1,784	1,741
14	- 1,355	2,897	0,601
15	- 2,127	0,142	0,162
16	- 1,429	1,254	- 0,974
17	- 0,028	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	115,96	13.5.4	109,64
1.2.3	112,51	13.5.6	109,64
2.3.4	111,28	14.5.4	109,69
i	43,61	14.5.6	109,70
i'	44,75	15.6.5	109,85
1.6.5	111,22	15.6.1	109,85
7.2.1	110,28	16.6.5	109,76
7.2.3	110,29	16.6.1	109,76
8.2.1	110,17	17.1.6	120,73
8.2.3	110,18	17.1.2	123,31
9.3.2	110,21	7.2.8	102,99
9.3.4	109,98	9.3.10	105,14
10.3.2	110,18	11.4.12	105,87
10.3.4	110,14	13.5.14	105,27
11.4.3	109,77	15.6.16	106,28
11.4.5	109,72	4.5.6	112,63
12.4.3	109,61	3.4.5	111,50
12.4.5	110,18		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	48,30	3.4.5.6	54,94
6.1.2.7	171,90	3.4.5.14	67,91
6.1.2.8	75,08	3.4.5.13	176,97
17.1.2.3	131,70	11.4.5.6	67,26
17.1.2.7	8,10	11.4.5.14	170,25
17.1.2.8	104,92	11.4.5.13	55,12
1.2.3.4	4,91	12.4.5.6	176,55
1.2.3.9	127,01	12.4.5.14	54,06
1.2.3.10	117,40	12.4.5.13	61,07
7.2.3.4	118,68	4.5.6.1	3,00
7.2.3.9	3,42	4.5.6.15	118,82
7.2.3.10	119,01	4.5.6.16	124,66
8.2.3.4	128,29	13.5.6.1	125,38
8.2.3.9	109,61	13.5.6.15	3,55
8.2.3.10	5,97	13.5.6.16	112,97
2.3.4.5	55,24	14.5.6.1	119,48
2.3.4.11	66,57	14.5.6.15	118,69
2.3.4.12	177,53	14.5.6.16	2,17
9.3.4.5	177,56	5.6.1.2	49,05
9.3.4.11	55,75	16.6.1.2	72,61
9.3.4.12	60,15	15.6.1.2	170,87
10.3.4.5	67,17	15.6.1.17	9,13
10.3.4.11	171,02	16.6.1.17	107,39
10.3.4.12	55,12	5.6.1.17	130,95

cyclohexanone

conformation bateau

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	0,961
Wb	0,742
Wd	5,762
ΣW	7,465

$\Delta\theta_{2.1.6}$	3'
ΔW	0,015 kcal

FIGURE : 46

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,280	0,801	0
3	1,265	1,849	1,117
4	0	1,731	1,974
5	- 1,265	1,849	1,117
6	- 1,280	0,801	0
7	2,130	0,138	0,128
8	1,405	1,291	- 0,960
9	2,167	1,713	1,767
10	1,334	2,876	0,678
11	0	2,530	2,760
12	0	0,745	2,505
13	- 2,167	1,713	1,967
14	- 1,334	2,876	0,678
15	- 2,130	0,138	0,128
16	- 1,405	1,291	- 0,960
17	0	- 1,225	0

cyclohexanone

conformation bateau

10 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.6	115,96
1.2.3	110,74
2.3.4	111,34
3.4.5	111,29
11.4.3	109,74
7.2.1	109,86
9.3.2	109,37
8.2.1	109,71
10.3.2	109,92
12.4.3	109,42
17.1.2	122,02
7.2.8	106,88
9.3.10	106,82
11.4.12	107,14

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	1,183
Wb . . .	0,143
Wd . . .	5,690
ΣW . . .	7,017

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	7,21
17.1.2.3	128,75
17.1.2.8	110,01
6.1.2.7	172,79
6.1.2.3	51,25
6.1.2.8	69,99
7.2.3.9	3,08
7.2.3.4	117,89
7.2.3.10	120,06
1.2.3.9	124,62
1.2.3.4	3,64
1.2.3.10	118,40
8.2.3.9	114,14
8.2.3.4	124,88
8.2.3.10	2,84
9.3.4.5	177,46
9.3.4.12	56,41
9.3.4.11	60,89
2.3.4.5	56,48
2.3.4.12	64,57
2.3.4.11	178,14
10.3.4.5	65,56
10.3.4.12	173,39
10.3.4.11	56,09

FIGURE : 47

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
2	0	0	0
3	1,263	0,867	0
4	1,191	1,962	1,069
5	- 0,058	1,831	1,948
6	- 1,291	1,943	1,046
1	- 1,245	0,855	0
17	- 2,159	0,679	- 0,796
7	0	- 0,690	0,837
8	0	- 0,690	- 0,837
9	2,183	0,240	0,127
10	1,451	1,306	- 1,014
11	2,122	1,977	1,693
12	1,255	2,982	0,609
14	- 0,072	2,619	2,746
13	- 0,055	0,861	2,510
15	- 2,206	1,887	1,627
16	- 1,353	2,924	0,587

cyclohexanone

conformation bateau dissymétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
1.2.3	111,05	13.5.4	111,01
2.3.4	111,44	13.5.6	110,97
3.4.5	112,19	17.1.6	122,04
i	44,27	14.5.4	111,08
i'	43,86	14.5.6	111,08
2.1.6	115,67	15.6.5	111,11
7.2.1	111,09	15.6.1	111,10
7.2.3	111,10	16.6.5	111,11
8.2.1	111,10	16.6.1	111,12
8.2.3	111,10	17.1.2	122,29
9.3.2	111,08	7.2.8	101,03
9.3.4	111,09	9.3.10	100,59
10.3.2	111,09	11.4.12	99,71
10.3.4	111,09	13.5.14	104,52
11.4.3	111,03	15.6.16	103,01
11.4.5	111,05	4.5.6	108,21
12.4.3	111,13	1.6.5	109,30
12.4.5	111,09		

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	1,191
Wb . . .	3,214
Wd . . .	3,834
ΣW . . .	8,239

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	48,87	3.4.5.14	177,95
7.2.3.10	159,96	3.4.5.13	62,11
7.2.3.4	75,59	3.4.5.6	60,06
8.2.3.9	62,77	14.5.6.15	56,22
8.2.3.10	48,32	14.5.6.16	57,84
8.2.3.4	172,77	14.5.6.5	179,18
1.2.3.9	173,04	13.5.6.15	59,59
1.2.3.10	75,87	13.5.6.16	173,65
1.2.3.4	48,59	13.5.6.5	63,37
9.3.4.11	5,80	4.5.6.15	178,24
9.3.4.12	115,83	4.5.6.16	64,17
9.3.4.5	119,12	4.5.6.5	58,81
10.3.4.11	105,29	15.6.1.2	127,34
10.3.4.12	4,73	16.6.1.2	118,60
10.3.4.5	129,79	5.6.1.2	4,38
2.3.4.11	130,26	15.6.1.17	52,66
2.3.4.12	119,72	16.6.1.17	61,40
2.3.4.5	5,33	5.6.1.17	175,63
11.4.5.14	53,03	6.1.2.7	73,94
11.4.5.13	62,80	6.1.2.8	174,43
11.4.5.6	175,02	6.1.2.3	50,24
12.4.5.14	56,98	17.1.2.7	106,06
12.4.5.13	172,82	17.1.2.8	5,57
12.4.5.6	65,01	17.1.2.3	129,76

$\Delta\theta_{2.1.6}$	24'
ΔW	0,1 kcal

FIGURE : 48

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,287	0,790	0
3	1,217	2,129	- 0,740
4	- 0,075	2,935	- 0,449
5	- 1,020	2,200	0,536
6	- 1,287	0,790	0
7	1,571	0,974	1,031
8	2,076	0,181	- 0,429
9	2,110	2,762	- 0,497
10	1,251	1,940	- 1,844
11	0,197	3,934	- 0,020
12	- 0,618	3,121	- 1,412
13	- 0,550	2,155	1,552
14	- 1,976	2,778	0,626
15	- 2,012	0,288	0,632
16	- 1,702	0,826	- 1,002
17	- 0,001	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	116,95	13.5.4	111,12
1.2.3	114,73	13.5.6	110,68
2.3.4	114,00	14.5.4	110,31
i	28,89	14.5.6	110,74
i'	20,47	15.6.5	109,75
1.6.5	109,44	15.6.1	109,16
7.2.1	108,17	16.6.5	111,04
7.2.3	108,78	16.6.1	110,09
8.2.1	109,07	17.1.6	121,47
8.2.3	109,43	17.1.2	121,58
9.3.2	110,64	7.2.8	106,32
9.3.4	110,53	9.3.10	106,57
10.3.2	109,07	11.4.12	107,38
10.3.4	108,51	13.5.14	107,79
11.4.3	110,68	15.6.16	107,32
11.4.5	110,35	4.5.6	108,70
12.4.3	110,47	3.4.5	112,38
12.4.5	110,48		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	32,13	3.4.5.6	53,51
6.1.2.7	89,50	3.4.5.14	174,35
6.1.2.8	155,26	3.4.5.13	67,72
17.1.2.3	147,87	11.4.5.6	175,05
17.1.2.7	90,50	11.4.5.14	64,12
17.1.2.8	24,74	11.4.5.13	53,82
1.2.3.4	43,14	12.4.5.6	67,85
1.2.3.9	166,54	12.4.5.14	52,99
1.2.3.10	76,54	12.4.5.13	170,92
7.2.3.4	78,15	4.5.6.1	64,94
7.2.3.9	45,25	4.5.6.15	175,29
7.2.3.10	162,17	4.5.6.16	56,80
8.2.3.4	166,09	13.5.6.1	55,79
8.2.3.9	70,52	13.5.6.15	63,98
8.2.3.10	46,40	13.5.6.16	177,54
2.3.4.5	0	14.5.6.1	175,27
2.3.4.11	121,36	14.5.6.15	55,50
2.3.4.12	121,37	14.5.6.16	62,99
9.3.4.5	124,14	5.6.1.2	21,77
9.3.4.11	2,79	16.6.1.2	100,54
9.3.4.12	114,49	15.6.1.2	141,90
10.3.4.5	120,69	15.6.1.17	38,10
10.3.4.11	117,96	16.6.1.17	79,46
10.3.4.12	0,67	5.6.1.17	158,23

cyclohexanone

conformation bateau déformé

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	1,006
Wb	0,950
Wd	4,206
ΣW	6,162

$\Delta\theta_{2.1.6}$	21"
ΔW	10^{-3} kcal

FIGURE : 49

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,276	0,807	0
3	1,245	1,843	1,128
4	0	2,733	1,057
5	- 1,245	1,843	1,128
6	- 1,276	0,807	0
7	2,130	0,149	0,125
8	1,394	1,308	- 0,955
9	1,255	1,309	2,113
10	2,170	2,473	1,098
11	0	3,943	2,021
12	0	3,217	0,047
13	- 1,255	1,309	2,113
14	- 2,170	2,473	1,098
15	- 2,130	0,149	0,125
16	- 1,394	1,308	- 0,955
17	0	- 1,225	0
18	0	3,427	3,870
19	1,517	5,083	1,735
20	- 1,517	5,083	1,735

Angles (d°)	
2.1.6	115,38
1.2.3	110,13
2.3.4	112,01
3.4.5	108,71
7.2.1	109,93
8.2.1	109,78
9.3.2	108,98
10.3.2	110,08
11.4.3	115,15
12.4.3	107,06
7.2.8	107,24
9.3.10	106,56
11.4.12	102,95
18.11.4	112,98
18.11.19	107,65
19.11.20	104,42

Dièdres (d°)			
17.1.2.7	6,58	9.3.4.11	67,27
17.1.2.3	127,80	2.3.4.5	57,94
17.1.2.8	111,38	2.3.4.12	57,92
6.1.2.7	173,42	2.3.4.11	171,78
6.1.2.3	52,20	10.3.4.5	179,44
6.1.2.8	68,62	10.3.4.12	64,71
7.2.3.9	55,00	10.3.4.11	49,15
7.2.3.4	175,95	3.4.11.18	63,50
7.2.3.10	61,42	3.4.11.19	58,29
1.2.3.9	66,22	3.4.11.20	174,72
1.2.3.4	54,73	5.4.11.18	63,50
1.2.3.10	177,36	5.4.11.19	174,72
8.2.3.9	172,95	5.4.11.20	58,29
8.2.3.4	66,10	12.4.11.18	180,00
8.2.3.10	56,53	12.4.11.19	58,22
9.3.4.5	63,01	12.4.11.20	58,22
9.3.4.12	178,88		

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	8,901
Wb . .	3,757
Wd . .	0,359
ΣW . .	13,017

tertiobutyl-4 cyclohexanone - chaise

- $C(CH_3)_3$ eq

13 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 50

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,278	0,804	0
3	1,261	1,854	1,115
4	0	2,721	1,037
5	- 1,261	1,854	1,115
6	- 1,278	0,804	0
7	2,126	0,140	0,138
8	1,395	1,297	- 0,959
9	1,301	1,342	2,110
10	2,169	2,505	1,031
11	0	3,886	2,054
12	0	3,281	0,068
13	- 1,301	1,342	2,110
14	- 2,169	2,505	1,031
15	- 2,126	0,140	0,138
16	- 1,395	1,297	- 0,959
17	0	- 1,225	0
18	0	3,170	3,835
19	1,579	4,949	1,807
20	- 1,579	4,949	1,807

Angles (d°)	
2.1.6	115,69
1.2.3	110,82
2.3.4	111,11
3.4.5	110,82
11.4.3	113,13
7.2.1	109,60
9.3.2	109,41
8.2.1	109,45
10.3.2	109,58
12.4.3	109,05
4.11.18	109,17
4.11.19	109,42
19.11.20	110,70
11.4.12	101,09
17.1.2	122,15
7.2.8	107,84
9.3.10	107,66
19.11.18	109,04

Dièdres (d°)			
17.1.2.7	7,77	9.3.4.11	64,75
17.1.2.3	128,87	2.3.4.5	57,39
17.1.2.8	110,31	2.3.4.12	62,68
6.1.2.7	172,22	2.3.4.11	174,32
6.1.2.3	51,12	10.3.4.5	178,63
6.1.2.8	69,69	10.3.4.12	58,57
7.2.3.9	53,22	10.3.4.11	53,08
7.2.3.4	174,14	3.4.11.18	63,54
7.2.3.10	64,61	3.4.11.19	55,73
1.2.3.9	67,88	3.4.11.20	177,18
1.2.3.4	53,04	5.4.11.18	63,54
1.2.3.10	174,28	5.4.11.19	177,18
8.2.3.9	171,30	5.4.11.20	55,73
8.2.3.4	67,77	12.4.11.18	179,90
8.2.3.10	53,48	12.4.11.19	60,72
9.3.4.5	63,54	12.4.11.20	60,72
9.3.4.12	176,39		

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	12,053
Wb . .	1,753
Wd . .	0,353
ΣW . .	14,159

Δθ	20"
ΔW	0,1 kcal

tertiobutyl-4 cyclohexanone chaise

- $C(CH_3)_3$ eq.

13 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

FIGURE : 50 **Bis**

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,284	0,794	0
3	1,249	1,868	- 1,092
4	0	2,754	- 1,100
5	- 1,249	1,868	- 1,100
6	- 1,284	0,794	0
7	1,460	1,241	0,973
8	2,119	0,124	- 0,182
9	2,182	2,487	- 1,078
10	1,278	1,334	- 2,077
11	0	4,015	- 0,203
12	0	3,252	- 2,103
13	- 2,182	2,487	- 1,078
14	- 1,278	1,334	- 2,077
15	- 1,460	1,241	0,973
16	- 2,119	1,249	- 0,182
17	0	- 1,225	0
18	0	3,662	1,684
19	1,513	5,136	- 0,574
20	- 1,513	5,136	- 0,574

tertiobutyl-4 cyclohexanone - chaise

- $C(CH_3)_3$ ax

13 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.6	116,56
1.2.3	110,43
2.3.4	115,31
3.4.5	109,28
7.2.1	110,76
8.2.1	109,27
9.3.2	111,06
10.3.2	107,01
11.4.3	117,96
12.4.3	105,15
7.2.8	106,25
9.3.10	104,65
11.4.12	99,04
18.11.4	114,82
18.11.19	107,28
19.11.20	104,10

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	9,435
Wb . .	7,730
Wd . .	1,482
ΣW . .	18,647

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	106,47
17.1.2.3	130,46
17.1.2.8	10,24
6.1.2.7	73,53
6.1.2.3	49,54
6.1.2.8	169,76
7.2.3.9	54,91
7.2.3.4	72,56
7.2.3.10	168,56
1.2.3.9	177,98
1.2.3.4	50,51
1.2.3.10	68,37
8.2.3.9	61,80
8.2.3.4	170,73
8.2.3.10	51,85
9.3.4.5	178,94
9.3.4.12	68,64
9.3.4.11	40,51
2.3.4.5	51,47
2.3.4.12	163,90
2.3.4.11	86,95
10.3.4.5	67,41
10.3.4.12	45,02
10.3.4.11	154,17
3.4.11.18	67,42
3.4.11.19	54,73
3.4.11.20	170,44
5.4.11.18	67,42
5.4.11.19	170,44
5.4.11.20	54,73
12.4.11.18	180,00
12.4.11.19	57,85
12.4.11.20	57,85

FIGURE : 51

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,286	0,791	0
3	1,306	1,902	1,055
4	0,024	2,735	0,951
5	- 1,260	1,906	1,051
6	- 1,286	0,791	0
7	2,124	0,121	0,159
8	1,439	1,224	- 0,983
9	1,439	1,124	2,805
10	2,840	3,040	0,846
11	0,024	3,530	1,742
12	0,027	3,305	- 0,014
13	- 1,406	1,140	2,806
14	- 2,787	3,047	0,825
15	- 2,126	0,129	0,181
16	- 1,452	1,217	- 0,984
17	- 0,016	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	116,78	13.5.4	109,81
1.2.3	113,05	13.5.6	109,60
2.3.4	109,66	14.5.4	109,72
i	43,51	14.5.6	109,75
i'	43,32	15.6.5	110,05
1.6.5	111,52	15.6.1	109,85
7.2.1	109,50	16.6.5	109,86
7.2.3	109,67	16.6.1	109,65
8.2.1	109,24	17.1.6	120,88
8.2.3	109,42	17.1.2	122,34
9.3.2	109,54	7.2.8	105,69
9.3.4	109,83	9.3.10	106,53
10.3.2	111,43	11.4.12	104,27
10.3.4	109,79	13.5.14	106,54
11.4.3	109,75	15.6.16	105,76
11.4.5	109,74	4.5.6	111,30
12.4.3	109,41	3.4.5	113,78
12.4.5	109,46		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	48,43	3.4.5.6	55,64
6.1.2.7	171,04	3.4.5.14	177,31
6.1.2.8	73,66	3.4.5.13	65,90
17.1.2.3	131,57	11.4.5.6	179,05
17.1.2.7	8,96	11.4.5.14	59,28
17.1.2.8	106,34	11.4.5.13	57,50
1.2.3.4	49,78	12.4.5.6	67,10
1.2.3.9	70,83	12.4.5.14	54,58
1.2.3.10	171,55	12.4.5.13	171,36
7.2.3.4	172,29	4.5.6.1	49,45
7.2.3.9	51,68	4.5.6.15	171,62
7.2.3.10	65,94	4.5.6.16	72,33
8.2.3.4	72,21	13.5.6.1	72,22
8.2.3.9	167,18	13.5.6.15	49,95
8.2.3.10	49,56	13.5.6.16	166,00
2.3.4.5	54,98	14.5.6.1	171,10
2.3.4.11	178,38	14.5.6.15	66,73
2.3.4.12	67,78	14.5.6.16	49,32
9.3.4.5	65,44	5.6.1.2	47,52
9.3.4.11	57,96	16.6.1.2	74,38
9.3.4.12	171,79	15.6.1.2	169,80
10.3.4.5	177,73	15.6.1.17	10,20
10.3.4.11	58,87	16.6.1.17	105,62
10.3.4.12	54,97	5.6.1.17	132,48

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone
conformation chaise
27 variables
fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	15,695
Wb	2,967
Wd	0,633
ΣW	19,294

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2'
ΔW	10^{-3} kcal

FIGURE : 52

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,280	0,802	0
3	1,289	1,742	1,209
4	0	2,570	1,226
5	- 1,289	1,742	1,209
6	- 1,280	0,802	0
7	2,141	0,143	0,024
8	1,354	1,378	- 0,916
9	1,461	0,738	2,837
10	2,813	2,907	1,121
11	0	3,256	2,111
12	0	3,266	0,348
13	- 1,461	0,738	2,837
14	- 2,813	2,907	1,121
15	- 2,141	0,143	0,024
16	- 1,354	1,378	- 0,916
17	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	115,86
1.2.3	109,35
2.3.4	109,55
3.4.5	114,61
11.4.3	109,85
7.2.1	110,53
9.3.2	110,41
8.2.1	109,89
10.3.2	109,94
12.4.3	109,10
17.1.2	122,07
7.2.8	106,62
9.3.10	106,55
11.4.12	103,73

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	1,32
17.1.2.3	123,21
17.1.2.8	116,08
6.1.2.7	178,68
6.1.2.3	56,79
6.1.2.8	63,92
7.2.3.9	52,91
7.2.3.4	174,72
7.2.3.10	64,37
1.2.3.9	68,98
1.2.3.4	52,83
1.2.3.10	173,74
8.2.3.9	170,32
8.2.3.4	67,88
8.2.3.10	53,04
9.3.4.5	66,26
9.3.4.12	171,10
9.3.4.11	57,96
2.3.4.5	55,55
2.3.4.12	67,09
2.3.4.11	179,78
10.3.4.5	176,46
10.3.4.12	53,82
10.3.4.11	59,32

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone
conformation chaise
10 variables
fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	15,388
Wb . . .	2,887
Wd . . .	3,111
ΣW . . .	18,586

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2'
ΔW	0,02kcal

FIGURE : 53

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,270	0,817	0
3	1,287	1,782	1,189
4	0	2,612	1,211
5	- 1,287	1,782	1,189
6	- 1,270	0,817	0
7	2,161	0,200	- 0,048
8	1,377	1,358	- 0,934
9	1,557	0,854	2,848
10	2,847	2,902	1,164
11	0	3,358	2,046
12	0	3,323	0,346
13	- 1,557	0,854	2,848
14	- 2,847	2,902	1,164
15	- 2,161	0,200	- 0,048
16	- 1,377	1,358	- 0,934
17	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	114,50
1.2.3	110,51
2.3.4.	110,04
3.4.5	114,36
7.2.1	112,53
8.2.1	110,65
9.3.2	111,58
10.3.2	111,51
11.4.3	111,80
12.4.3	109,44
17.1.2	122,74
i	50,0°

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	10,683
Wb . .	5,954
Wd . .	1,087
W . .	17,724kcal

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone

conformation chaise

10 variables

fonctions :

C--C $16600\ e^{-3,63r} - 325/r^6$

C--H $30000\ e^{-4,17r} - 140/r^6$

H--H $10000\ e^{-4,6r} - 49,2/r^6$

FIGURE : 54

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,281	0,800	0
3	1,273	1,908	1,059
4	0,023	1,853	1,943
5	- 1,235	1,895	1,070
6	- 1,281	0,800	0
7	2,139	0,149	0,132
8	1,470	1,216	- 0,984
9	2,858	1,816	2,138
10	1,438	3,632	0,230
11	0,031	0,927	2,576
12	0,024	2,702	2,676
13	- 2,816	1,843	2,159
14	- 1,452	3,630	0,276
15	- 2,139	0,153	0,146
16	- 1,465	1,229	- 0,980
17	- 0,009	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	116,00	13.5.4	110,63
1.2.3	112,26	13.5.6	110,64
2.3.4	112,15	14.5.4	110,69
i	43,71	14.5.6	110,70
i'	44,32	15.6.5	110,82
1.6.5	110,71	15.6.1	110,81
7.2.1	110,66	16.6.5	110,71
7.2.3	110,66	16.6.1	110,70
8.2.1	110,54	17.1.6	121,59
8.2.3	110,55	17.1.2	122,40
9.3.2	110,48	7.2.8	101,69
9.3.4	110,32	9.3.10	102,41
10.3.2	110,53	11.4.12	104,85
10.3.4	110,55	13.5.14	99,56
11.4.3	110,47	15.6.16	102,86
11.4.5	110,47	4.5.6	113,74
12.4.3	110,48	3.4.5	109,90
12.4.5	110,60		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	48,30	3.4.5.6	55,25
6.1.2.7	172,49	3.4.5.14	70,12
6.1.2.8	75,64	3.4.5.13	179,49
17.1.2.3	131,70	11.4.5.6	66,89
17.1.2.7	7,51	11.4.5.14	167,74
17.1.2.8	104,36	11.4.5.13	58,35
1.2.3.4	5,19	12.4.5.6	177,48
1.2.3.9	128,70	12.4.5.14	52,11
1.2.3.10	118,66	12.4.5.13	57,28
7.2.3.4	118,99	4.5.6.1	4,45
7.2.3.9	4,52	4.5.6.15	118,93
7.2.3.10	117,16	4.5.6.16	127,60
8.2.3.4	129,13	13.5.6.1	129,69
8.2.3.9	107,36	13.5.6.15	6,31
8.2.3.10	5,28	13.5.6.16	107,16
2.3.4.5	55,13	14.5.6.1	120,91
2.3.4.11	67,01	14.5.6.15	115,71
2.3.4.12	177,43	14.5.6.16	2,24
9.3.4.5	178,73	5.6.1.2	48,33
9.3.4.11	56,60	16.6.1.2	74,83
9.3.4.12	58,96	15.6.1.2	171,71
10.3.4.5	68,72	15.6.1.17	8,29
10.3.4.11	169,14	16.6.1.17	105,17
10.3.4.12	53,58	5.6.1.17	131,67

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone

conformation bateau

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	20,230
Wb	7,457
Wd	5,729
ΣW	33,416

$\Delta\theta_{2.1.6}$	6"
ΔW	$9\ 10^{-3}$ kcal

FIGURE : 55

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,283	0,796	0
3	1,273	1,849	1,112
4	0	1,718	1,955
5	- 1,273	1,849	1,112
6	- 1,283	0,796	0
7	2,134	0,133	0,120
8	1,434	1,268	- 0,965
9	2,828	1,660	2,222
10	1,431	3,618	0,382
11	0	2,474	2,781
12	0	0,720	2,464
13	- 2,828	1,660	2,222
14	- 1,431	3,618	0,382
15	- 2,134	0,133	0,120
16	- 1,434	1,268	- 0,965
17	0	- 1,225	0

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone

conformation bateau symétrique

10 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.6	116,40
1.2.3	110,89
2.3.4	110,23
3.4.5	112,36
11.4.3	110,33
7.2.1	110,17
9.3.2	110,27
8.2.1	110,31
10.3.2	110,91
12.4.3	109,06
17.1.2	121,80
7.2.8	104,83
9.3.10	104,12
11.4.12	105,46

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	21,082
Wb . . .	3,875
Wd . . .	5,658
ΣW . . .	30,615

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	6,78
17.1.2.3	129,01
17.1.2.8	108,48
6.1.2.7	173,22
6.1.2.3	50,99
6.1.2.8	71,52
7.2.3.9	3,59
7.2.3.4	118,39
7.2.3.10	118,38
1.2.3.9	125,82
1.2.3.4	3,84
1.2.3.10	119,38
8.2.3.9	111,67
8.2.3.4	126,34
8.2.3.10	3,12
9.3.4.5	179,51
9.3.4.12	58,47
9.3.4.11	56,92
2.3.4.5	57,53
2.3.4.12	63,52
2.3.4.11	178,91
10.3.4.5	65,69
10.3.4.12	173,26
10.3.4.11	57,87

$\Delta\theta_{2.1.6}$	4'
ΔW	10^{-3} kcal

FIGURE : 56

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
2	0	0	0
3	1,275	0,850	0
4	1,226	1,967	1,048
5	- 0,049	1,914	1,895
6	- 1,328	1,919	1,051
1	- 1,256	0,838	0
17	- 2,162	0,652	- 0,804
7	0	- 0,706	0,824
8	0	- 0,705	- 0,824
9	2,836	- 0,244	0,226
10	1,635	1,557	- 1,748
11	2,142	1,955	1,694
12	1,354	2,974	0,572
14	- 0,075	3,317	3,209
13	- 0,020	0,417	3,101
15	- 2,209	1,801	1,674
16	- 1,496	2,892	0,601

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone

conformation bateau dissymétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
1.2.3	112,60	12.4.5	111,14
2.3.4.	112,21	13.5.4	111,38
3.4.5	112,30	13.5.6	111,31
i	43,15	14.5.4	111,20
i'	43,13	14.5.6	111,19
2.1.6	115,92	15.6.5	111,15
17.1.6	122,03	15.6.1	111,14
7.2.1	111,17	16.6.5	111,14
7.2.3	111,17	16.6.1	111,14
8.2.1	111,14	17.1.2	122,05
8.2.3	111,14	7.2.8	98,84
9.3.2	111,13	9.3.10	99,47
9.3.4	111,14	11.4.12	99,26
10.3.2	111,12	13.5.14	98,00
10.3.4	111,13	15.6.16	102,13
11.4.3	111,15	4.5.6	112,99
11.4.5	111,15	1.6.5	109,94
12.4.3	111,15		

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	20,400
Wb . . .	11,209
Wd . . .	4,171
ΣW . . .	35,780

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	47,25	3.4.5.14	179,52
7.2.3.10	157,02	3.4.5.13	71,36
7.2.3.4	77,87	3.4.5.6	54,40
8.2.3.9	61,81	14.5.6.15	58,43
8.2.3.10	47,96	14.5.6.16	54,61
8.2.3.4	173,07	14.5.6.5	178,09
1.2.3.9	172,75	13.5.6.15	49,67
1.2.3.10	77,48	13.5.6.16	162,72
1.2.3.4	47,63	13.5.6.5	73,80
9.3.4.11	3,36	4.5.6.15	175,45
9.3.4.12	112,92	4.5.6.16	71,51
9.3.4.5	121,87	4.5.6.5	51,96
10.3.4.11	106,42	15.6.1.2	123,01
10.3.4.12	3,14	16.6.1.2	123,96
10.3.4.5	128,35	5.6.1.2	0,45
2.3.4.11	128,48	15.6.1.17	56,99
2.3.4.12	121,94	16.6.1.17	56,04
2.3.4.5	3,25	5.6.1.17	179,54
11.4.5.14	54,28	6.1.2.7	74,78
11.4.5.13	53,87	6.1.2.8	176,17
11.4.5.6	179,67	6.1.2.3	50,72
12.4.5.14	55,27	17.1.2.7	105,22
12.4.5.13	163,42	17.1.2.8	3,83
12.4.5.6	70,81	17.1.2.3	129,28

$\Delta\theta_{2.1.6}$	10'
ΔW	0,04 kcal

FIGURE : 57

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,292	0,782	0
3	1,252	2,134	0,720
4	- 0,077	2,936	0,443
5	- 1,109	2,216	- 0,508
6	- 1,292	0,782	0
7	2,063	0,155	0,434
8	1,615	0,909	- 1,028
9	1,443	1,844	2,609
10	2,753	3,202	0,178
11	- 0,600	3,115	1,419
12	0,168	3,932	- 0,009
13	- 2,774	3,172	- 0,472
14	- 0,505	2,264	- 2,330
15	- 1,677	0,803	1,014
16	- 2,030	0,252	- 0,593
17	- 0,002	- 1,225	0

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone

conformation croisée

27 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	117,61	13.5.4	111,26
1.2.3	115,79	13.5.6	110,89
2.3.4	113,53	14.5.4	112,90
i	28,04	14.5.6	112,07
i'	19,36	15.6.5	109,49
1.6.5	112,52	15.6.1	108,32
7.2.1	108,00	16.6.5	110,90
7.2.3	109,88	16.6.1	109,19
8.2.1	108,37	17.1.6	121,10
8.2.3	110,48	17.1.2	121,29
9.3.2	109,05	7.2.8	103,58
9.3.4	111,53	9.3.10	106,51
10.3.2	109,78	11.4.12	108,17
10.3.4	111,10	13.5.14	106,15
11.4.3	111,82	15.6.16	106,18
11.4.5	110,04	4.5.6	107,76
12.4.3	112,91	3.4.5	115,17
12.4.5	110,81		

Energie (Kcal/mole)	
Wa	17,936
Wb	3,868
Wd	4,597
ΣW	26,401

$\Delta\theta_{2.1.6}$	10'
ΔW	$2\ 10^{-3}$ kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	31,47	3.4.5.6	49,17
6.1.2.7	155,13	3.4.5.14	73,75
6.1.2.8	93,27	3.4.5.13	169,70
17.1.2.3	148,53	11.4.5.6	71,82
17.1.2.7	24,87	11.4.5.14	165,27
17.1.2.8	86,73	11.4.5.13	48,72
1.2.3.4	41,00	12.4.5.6	172,04
1.2.3.9	80,83	12.4.5.14	49,13
1.2.3.10	162,83	12.4.5.13	67,42
7.2.3.4	163,67	4.5.6.1	59,98
7.2.3.9	41,83	4.5.6.15	60,53
7.2.3.10	74,51	4.5.6.16	177,39
8.2.3.4	82,65	13.5.6.1	179,44
8.2.3.9	155,51	13.5.6.15	58,93
8.2.3.10	39,18	13.5.6.16	57,92
2.3.4.5	0	14.5.6.1	62,14
2.3.4.11	120,06	14.5.6.15	177,36
2.3.4.12	121,80	14.5.6.16	60,50
9.3.4.5	121,61	5.6.1.2	21,03
9.3.4.11	154,65	16.6.1.2	144,63
9.3.4.12	116,59	15.6.1.2	100,15
10.3.4.5	122,24	15.6.1.17	79,85
10.3.4.11	117,70	16.6.1.17	35,37
10.3.4.12	0,43	5.6.1.17	158,97

FIGURE : 58

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,287	0,791	0
3	1,257	1,882	1,074
4	- 0,013	2,735	1,003
5	- 1,267	1,859	1,097
6	- 1,287	0,791	0
7	2,121	0,122	0,183
8 Br	1,578	1,585	- 1,746
9	1,322	1,405	2,086
10	2,154	2,547	0,970
11	- 0,012	3,481	1,840
12	- 0,028	3,307	0,039
13	- 1,293	1,359	2,100
14	- 2,182	2,502	1,013
15	- 2,126	0,121	0,158
16	- 1,417	1,265	- 0,967
17	- 0,006	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	116,86	13.5.6	109,23
1.2.3	110,91	14.5.4	109,61
2.3.4	112,34	14.5.6	109,58
i	44,52	15.6.5	109,65
i'	45,75	15.6.1	109,65
1.6.5	110,74	16.6.5	109,55
7.2.1	109,46	16.6.1	109,37
7.2.3	109,59	17.1.6	121,31
8.2.1	110,03	17.1.2	121,83
8.2.3	109,99	7.2.8	106,77
9.3.2	109,19	9.3.10	106,88
9.3.4	109,10	11.4.12	107,63
10.3.2	109,99	13.5.14	107,66
10.3.4	109,22	15.6.16	107,83
11.4.3	109,58	4.5.6	111,44
11.4.5	109,58	3.4.5	110,94
12.4.3	109,55		
12.4.5	109,49		
13.5.4	109,24		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	48,65	3.4.5.6	56,87
6.1.2.7	169,69	3.4.5.14	178,35
6.1.2.8	73,28	3.4.5.13	63,92
17.1.2.3	131,35	11.4.5.6	178,01
17.1.2.7	10,31	11.4.5.14	60,53
17.1.2.8	106,72	11.4.5.13	57,21
1.2.3.4	50,39	12.4.5.6	64,16
1.2.3.9	70,76	12.4.5.14	57,30
1.2.3.10	172,26	12.4.5.13	175,05
7.2.3.4	171,36	4.5.6.1	52,73
7.2.3.9	50,20	4.5.6.15	173,86
7.2.3.10	66,78	4.5.6.16	67,99
8.2.3.4	71,55	13.4.5.1	68,07
8.2.3.9	167,29	13.4.5.15	53,06
8.2.3.10	50,32	13.4.5.16	171,22
2.3.4.5	55,87	14.4.5.1	174,21
2.3.4.11	177,00	14.4.5.15	64,66
2.3.4.12	65,13	14.4.5.16	53,50
9.3.4.5	65,34	5.6.1.2	49,99
9.3.4.11	55,79	16.6.1.2	70,84
9.3.4.12	173,66	15.6.1.2	171,12
10.3.4.5	178,19	15.6.1.17	8,88
10.3.4.11	60,69	16.6.1.17	109,16
10.3.4.12	57,18	5.6.1.17	130,01

cyclohexanone ∝ bromée

Br ax

conformation chaise

27 variables

fonctions du tableau 8

μ(D)	
C = O	3,1
C - Br	2,2
μ_D	2,98D

Energie (Kcal/mole)	
Wa	1,497
Wb	0,195
Wd	0,445
Wdp	3,639
ΣW	5,776
W_L	- 1,875
$\Sigma W+W_L$	3,901

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

FIGURE : 61

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,290	0,785	0
3	1,283	1,894	1,057
4	0,023	2,757	0,948
5	- 1,227	1,879	1,070
6	- 1,290	0,785	0
7 Br	2,785	- 0,407	0,331
8	1,434	1,227	- 0,980
9	1,322	1,425	2,075
10	2,189	2,539	0,917
11	0,023	3,525	1,765
12	0,015	3,285	- 0,041
13	- 1,250	1,406	2,086
14	- 2,144	2,520	1,007
15	- 2,119	0,117	0,211
16	- 1,431	1,242	- 0,974
17	- 0,003	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	117,38	13.5.6	109,30
1.2.3	111,87	14.5.4	109,57
2.3.4	111,27	14.5.6	109,62
i	43,63	15.6.5	109,60
i'	44,31	15.6.1	109,45
1.6.5	109,63	16.6.5	109,33
7.2.1	109,80	16.6.1	109,28
7.2.3	109,30	17.1.6	121,19
8.2.1	109,01	17.1.2	121,44
8.2.3	109,17	7.2.8	107,59
9.3.2	108,90	9.3.10	109,06
9.3.4	109,13	11.4.12	108,67
10.3.2	109,10	13.5.14	105,98
10.3.4	109,34	15.6.16	109,55
11.4.3	109,55	4.5.6	112,82
11.4.5	109,58	3.4.5	110,02
12.4.3	109,50		
12.4.5	109,50		
13.5.4	109,33		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	48,03	3.4.5.6	58,54
6.1.2.7	169,57	3.4.5.14	179,05
6.1.2.8	72,80	3.4.5.13	63,29
17.1.2.3	131,97	11.4.5.6	179,05
17.1.2.7	10,43	11.4.5.14	58,54
17.1.2.8	107,20	11.4.5.13	57,21
1.2.3.4	50,92	12.4.5.6	61,85
1.2.3.9	69,41	12.4.5.14	60,57
1.2.3.10	171,64	12.4.5.13	176,31
7.2.3.4	172,75	4.5.6.1	52,45
7.2.3.9	52,42	4.5.6.15	172,50
7.2.3.10	66,53	4.5.6.16	67,32
8.2.3.4	69,82	13.4.5.1	69,41
8.2.3.9	169,85	13.4.5.15	50,74
8.2.3.10	50,91	13.4.5.16	170,82
2.3.4.5	56,69	14.4.5.1	174,85
2.3.4.11	177,21	14.4.5.15	65,00
2.3.4.12	63,71	14.4.5.16	55,08
9.3.4.5	63,51	5.6.1.2	47,87
9.3.4.11	57,01	16.6.1.2	71,93
9.3.4.12	176,10	15.6.1.2	168,11
10.3.4.5	177,28	15.6.1.17	11,89
10.3.4.11	62,21	16.6.1.17	108,07
10.3.4.12	56,88	5.6.1.17	132,13

cyclohexanone α bromée

Br eq.

conformation chaise

27 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br	1,9
μ_D	4,52D

Energie (Kcal/mole)	
Wa	0,961
Wb	0,475
Wd	0,417
Wdp	4,170
ΣW	6,023
W_L	- 1,240
$\Sigma W+W_L$	4,783

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

FIGURE : 62

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,293	0,780	0
3	1,236	1,953	0,984
4	0	1,875	1,886
5	- 1,263	1,923	1,021
6	- 1,293	0,780	0
7	2,116	0,126	0,265
8 Br	1,639	1,451	- 1,787
9	2,159	1,945	1,621
10	1,221	2,917	0,413
11	1,021	0,928	2,484
12	0	2,736	2,601
13	- 2,167	1,854	1,680
14	- 1,312	2,905	0,483
15	- 2,120	0,113	0,218
16	- 1,474	1,182	- 0,991
17	0,002	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	117,77	13.5.6	109,31
1.2.3	111,35	14.5.4	109,53
2.3.4	111,63	14.5.6	109,45
i	39,98	15.6.5	109,83
i'	41,77	15.6.1	109,59
1.6.5	111,63	16.6.5	109,62
7.2.1	109,76	16.6.1	109,52
7.2.3	109,43	17.1.6	121,22
8.2.1	109,35	17.1.2	121,01
8.2.3	109,49	7.2.8	107,36
9.3.2	109,22	9.3.10	107,90
9.3.4	109,23	11.4.12	108,03
10.3.2	109,37	13.5.14	107,51
10.3.4	109,41	15.6.16	106,51
11.4.3	110,00	4.5.6	111,65
11.4.5	110,05	3.4.5	109,36
12.4.3	109,65		
12.4.5	109,67		
13.5.4	109,29		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	43,62	3.4.5.6	58,32
6.1.2.7	164,95	3.4.5.14	63,07
6.1.2.8	77,51	3.4.5.13	179,40
17.1.2.3	136,38	11.4.5.6	62,65
17.1.2.7	15,05	11.4.5.14	175,96
17.1.2.8	102,49	11.4.5.13	58,41
1.2.3.4	10,44	12.4.5.6	178,63
1.2.3.9	131,34	12.4.5.14	57,23
1.2.3.10	110,78	12.4.5.13	60,32
7.2.3.4	111,08	4.5.6.1	6,66
7.2.3.9	9,82	4.5.6.15	115,11
7.2.3.10	127,69	4.5.6.16	128,19
8.2.3.4	131,49	13.4.5.1	127,71
8.2.3.9	107,61	13.4.5.15	5,93
8.2.3.10	10,27	13.4.5.16	110,76
2.3.4.5	60,57	14.4.5.1	114,78
2.3.4.11	60,43	14.4.5.15	123,45
2.3.4.12	179,12	14.4.5.16	6,75
9.3.4.5	178,54	5.6.1.2	45,78
9.3.4.11	60,47	16.6.1.2	75,81
9.3.4.12	58,22	15.6.1.2	167,68
10.3.4.5	60,63	15.6.1.17	12,32
10.3.4.11	178,37	16.6.1.17	104,19
10.3.4.12	59,68	5.6.1.17	134,22

cyclohexanone α bromée

Br ax.

conformation bateau

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	1,980
Wb	0,417
Wd	5,562
Wdp	3,721
ΣW	11,680
W_L	- 1,820
$\Sigma W+W_L$	9,860

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	2,2
μ_D	3,12D

$\Delta\theta_{2.1.6}$	3'
ΔW	10^{-3} kcal

FIGURE : 63

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,296	0,775	0
3	1,268	1,965	0,965
4	0,013	1,942	1,843
5	- 1,287	1,906	1,033
6	- 1,296	0,775	0
7 Br	2,772	- 0,398	0,458
8	1,496	1,132	- 1,005
9	2,177	1,932	1,619
10	1,294	2,919	0,378
11	0,054	0,944	2,544
12	0,008	2,973	2,520
13	- 2,155	1,779	1,730
14	- 1,430	2,889	0,512
15	- 2,123	0,102	0,199
16	- 1,472	1,186	- 0,989
17	0,005	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	118,24	13.5.6	109,31
1.2.3	112,51	14.5.4	109,54
2.3.4	111,38	14.5.6	109,45
i	39,03	15.6.5	109,83
i'	42,39	15.6.1	109,60
1.6.5	111,95	16.6.5	109,61
7.2.1	110,05	16.6.1	109,50
7.2.3	109,55	17.1.6	121,12
8.2.1	109,09	17.1.2	120,65
8.2.3	109,31	7.2.8	106,12
9.3.2	109,29	9.3.10	108,14
9.3.4	109,23	11.4.12	111,61
10.3.2	109,33	13.5.14	106,84
10.3.4	109,41	15.6.16	106,19
11.4.3	109,96	4.5.6	112,27
11.4.5	110,00	3.4.5	113,06
12.4.3	109,66		
12.4.5	109,68		
13.5.4	109,29		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	42,97	3.4.5.6	52,44
6.1.2.7	165,45	3.4.5.14	69,37
6.1.2.8	78,51	3.4.5.13	173,90
17.1.2.3	137,03	11.4.5.6	67,56
17.1.2.7	14,55	11.4.5.14	170,64
17.1.2.8	101,49	11.4.5.13	53,91
1.2.3.4	8,76	12.4.5.6	171,52
1.2.3.9	129,54	12.4.5.14	49,71
1.2.3.10	112,28	12.4.5.13	67,02
7.2.3.4	113,99	4.5.6.1	2,01
7.2.3.9	6,79	4.5.6.15	119,98
7.2.3.10	124,98	4.5.6.16	123,72
8.2.3.4	130,12	13.4.5.1	123,46
8.2.3.9	109,10	13.4.5.15	1,46
8.2.3.10	9,09	13.4.5.16	114,83
2.3.4.5	56,06	14.4.5.1	119,85
2.3.4.11	63,96	14.4.5.15	118,16
2.3.4.12	175,15	14.4.5.16	1,86
9.3.4.5	176,88	5.6.1.2	46,63
9.3.4.11	56,85	16.6.1.2	75,15
9.3.4.12	64,04	15.6.1.2	168,75
10.3.4.5	64,92	15.6.1.17	11,25
10.3.4.11	175,06	16.6.1.17	104,85
10.3.4.12	54,16	5.6.1.17	133,37

cyclohexanone α bromée

Br eq.

conformation bateau

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	1,499
Wb	0,684
Wd	5,840
Wdp	4,143
ΣW	12,165
W_L	- 1,490
$\Sigma W+W_L$	10,675

μ(D)	
C = O	2,8
C - Br	1,9
μ_D	4,19D

$\Delta\theta_{2.1.6}$	22'
ΔW	$2\ 10^{-4}$ kcal

FIGURE : 64

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,280	0,800	0
3	1,057	2,143	- 0,704
4	0,001	2,995	0,006
5	- 1,061	2,142	0,707
6	- 1,280	0,800	0
7	1,602	0,973	1,022
8 Br	2,700	- 0,179	- 0,889
9	2,022	2,710	- 0,766
10	0,729	1,946	- 1,758
11	0,495	3,659	0,762
12	- 0,490	3,671	- 0,742
13	- 0,736	1,940	1,761
14	- 2,025	2,709	0,769
15	- 2,061	0,237	0,500
16	- 1,607	0,969	- 1,021
17	- 0,006	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	115,98	13.5.6	108,54
1.2.3	109,93	14.5.4	109,86
2.3.4	112,02	14.5.6	110,20
i	27,36	15.6.5	110,16
i'	27,50	15.6.1	109,59
1.6.5	110,03	16.6.5	109,96
7.2.1	109,61	16.6.1	109,75
7.2.3	109,65	17.1.6	121,71
8.2.1	110,67	17.1.2	122,31
8.2.3	109,76	7.2.8	107,17
9.3.2	110,09	9.3.10	106,79
9.3.4	109,72	11.4.12	106,60
10.3.2	108,73	13.5.14	106,75
10.3.4	109,35	15.6.16	107,31
11.4.3	109,75	4.5.6	112,07
11.4.5	109,10	3.4.5	112,34
12.4.3	109,13		
12.4.5	109,76		
13.5.4	109,26		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	29,27	3.4.5.6	29,64
6.1.2.7	91,32	3.4.5.14	152,51
6.1.2.8	150,68	3.4.5.13	90,70
17.1.2.3	150,73	11.4.5.6	151,57
17.1.2.7	88,68	11.4.5.14	85,56
17.1.2.8	29,32	11.4.5.13	31,24
1.2.3.4	61,38	12.4.5.6	91,96
1.2.3.9	176,25	12.4.5.14	30,90
1.2.3.10	59,58	12.4.5.13	147,70
7.2.3.4	59,19	4.5.6.1	61,09
7.2.3.9	63,18	4.5.6.15	177,98
7.2.3.10	179,94	4.5.6.16	59,91
8.2.3.4	176,67	13.4.5.1	59,67
8.2.3.9	54,29	13.4.5.15	61,26
8.2.3.10	62,37	13.4.5.16	179,36
2.3.4.5	30,36	14.4.5.1	176,24
2.3.4.11	91,20	14.4.5.15	55,31
2.3.4.12	152,32	14.4.5.16	62,76
9.3.4.5	152,95	5.6.1.2	29,43
9.3.4.11	31,38	16.6.1.2	91,69
9.3.4.12	85,09	15.6.1.2	150,71
10.3.4.5	90,24	15.6.1.17	29,29
10.3.4.11	148,19	16.6.1.17	88,31
10.3.4.12	31,72	5.6.1.17	150,57

cyclohexanone α bromée

Br eq.

conformation croisée

27 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br	1,9
μ_D	4,12D

Energie (Kcal/mole)	
Wa	1,328
Wb	0,235
Wd	3,481
Wdp	3,875
ΣW	8,920
W_L	- 1,225
$\Sigma W+W_L$	7,695

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

FIGURE : 65

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,282	0,798	0
3	1,057	2,152	- 0,680
4	- 0,005	2,996	0,032
5	- 1,080	2,140	0,710
6	- 1,282	0,798	0
7 Br	1,960	1,040	1,802
8	2,039	0,243	- 0,545
9	2,022	2,720	- 0,735
10	0,735	1,968	- 1,737
11	0,482	3,649	0,802
12	- 0,485	3,683	- 0,712
13	- 0,784	1,944	1,773
14	- 2,047	2,706	0,746
15	- 2,064	0,229	0,493
16	- 1,604	0,967	- 1,022
17	- 0,005	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	116,23	13.5.6	108,70
1.2.3	110,01	14.5.4	109,72
2.3.4	112,51	14.5.6	110,11
i	26,33	15.6.5	110,11
i'	27,59	15.6.1	109,58
1.6.5	110,55	16.6.5	109,79
7.2.1	111,26	16.6.1	109,52
7.2.3	110,65	17.1.6	121,63
8.2.1	108,82	17.1.2	122,13
8.2.3	109,36	7.2.8	106,66
9.3.2	110,10	9.3.10	106,45
9.3.4	109,92	11.4.12	106,58
10.3.2	108,39	13.5.14	106,64
10.3.4	109,27	15.6.16	107,22
11.4.3	109,77	4.5.6	112,16
11.4.5	109,10	3.4.5	112,60
12.4.3	109,02		
12.4.5	109,60		
13.5.4	109,35		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	28,17	3.4.5.6	28,47
6.1.2.7	94,82	3.4.5.14	151,18
6.1.2.8	147,95	3.4.5.13	92,19
17.1.2.3	151,83	11.4.5.6	150,60
17.1.2.7	85,18	11.4.5.14	86,69
17.1.2.8	32,05	11.4.5.13	29,94
1.2.3.4	60,40	12.4.5.6	93,05
1.2.3.9	176,62	12.4.5.14	29,66
1.2.3.10	60,55	12.4.5.13	146,29
7.2.3.4	62,94	4.5.6.1	60,02
7.2.3.9	60,04	4.5.6.15	178,75
7.2.3.10	176,12	4.5.6.16	60,92
8.2.3.4	179,95	13.4.5.1	61,01
8.2.3.9	57,16	13.4.5.15	60,22
8.2.3.10	58,91	13.4.5.16	178,06
2.3.4.5	30,62	14.4.5.1	177,49
2.3.4.11	91,12	14.4.5.15	56,25
2.3.4.12	152,48	14.4.5.16	61,57
9.3.4.5	153,71	5.6.1.2	29,65
9.3.4.11	31,97	16.6.1.2	91,45
9.3.4.12	84,43	15.6.1.2	151,19
10.3.4.5	89,81	15.6.1.17	28,81
10.3.4.11	148,44	16.6.1.17	88,55
10.3.4.12	32,04	5.6.1.17	150,35

cyclohexanone α bromée

Br ax

conformation croisée

27 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	2,2
μ_D	3,57D

Energie (Kcal/mole)	
Wa	2,026
Wb	0,328
Wd	3,574
Wdp	3,874
ΣW	9,803
W_L	- 1,837
$\Sigma W+W_L$	7,965

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	$2\ 10^{-3}$ kcal

FIGURE : 66

Atomes	Coordonnées (Å)		
	X	Y	Z
2	0	0	0
3	1,269	0,859	0
4	1,222	1,958	1,066
5	-0,051	1,885	1,915
6	-1,315	1,929	1,051
1	-1,251	0,846	0
17	-2,157	0,666	-0,804
7 Br	0	-1,249	1,484
8	0	-0,699	-0,830
9	2,186	0,225	0,113
10	1,466	1,289	-1,016
11	2,140	1,936	1,710
12	1,345	2,973	0,606
14	-0,065	2,690	2,693
13	-0,045	0,983	2,578
15	-2,209	1,831	1,659
16	-1,403	2,878	0,532

cyclohexanone α bromée
conformation bateau dissymétrique
27 variables
fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
1.2.3	112,82	13.5.4	111,15
2.3.4	112,14	13.5.6	111,15
3.4.5	112,14	14.5.4	111,15
i	44,10	14.5.6	111,15
i'	44,10	15.6.5	111,15
2.1.6	115,93	15.6.1	111,15
17.1.6	122,02	16.6.5	111,15
7.2.1	111,15	16.6.1	107,34
7.2.3	111,15	17.1.2	122,04
8.2.1	111,15	7.2.8	99,84
8.2.3	111,15	9.3.10	99,44
9.3.2	111,15	11.4.12	99,43
9.3.4	111,15	15.5.14	99,69
10.3.2	111,15	15.6.16	106,25
10.3.4	111,15	4.5.6	111,84
11.4.3	111,15	1.6.5	109,69
11.4.5	111,15		
12.4.3	111,15		
12.4.5	111,15		

Energie (Kcal/mole)	
Wa	3,014
Wb	4,205
Wd	3,990
Wdp . . .	3,605
ΣW	14,815

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	48,95	3.4.5.13	69,47
7.2.3.10	158,72	3.4.5.6	55,47
7.2.3.4	76,17	14.5.6.15	57,64
8.2.3.9	61,31	14.5.6.16	60,49
8.2.3.10	48,46	14.5.6.5	179,04
8.2.3.4	173,58	13.5.6.15	52,47
1.2.3.9	173,82	13.5.6.16	170,60
1.2.3.10	76,41	13.5.6.5	70,86
1.2.3.4	48,71	4.5.6.15	177,41
9.3.4.11	2,79	4.5.6.16	64,46
9.3.4.12	112,56	4.5.6.5	54,09
9.3.4.5	122,32	15.6.1.2	124,39
10.3.4.11	106,98	16.6.1.2	119,81
10.3.4.12	2,79	5.6.1.2	1,06
10.3.4.5	127,91	15.6.1.17	55,61
2.3.4.11	127,91	16.6.1.17	60,19
2.3.4.12	122,33	5.6.1.17	178,94
2.3.4.5	2,79	6.1.2.7	74,17
11.4.5.14	54,47	6.1.2.8	175,57
11.4.5.13	56,64	6.1.2.3	50,70
11.4.5.6	179,42	17.1.2.7	105,83
12.4.5.14	55,30	17.1.2.8	4,43
12.4.5.13	165,41	17.1.2.3	129,30
12.4.5.6	69,65		
3.4.5.14	179,59		

μ(D)	
C = O	3,1
C - Br	2,2
μ_D	2,98

FIGURE : 67

Atomes	Coordonnées (Å)		
	X	Y	Z
2	0	0	0
3	1,269	0,859	0
4	1,222	1,958	1,066
5	-0,051	1,885	1,915
6	-1,315	1,928	1,051
1	-1,251	0,846	0
17	-2,157	0,666	-0,804
7	0	-0,699	0,830
8 Br	0	-1,249	-1,484
9	2,186	0,225	0,113
10	1,466	1,289	-1,016
11	2,140	1,936	1,710
12	1,345	2,973	0,606
14	-0,065	2,690	2,693
13	-0,045	0,983	2,578
15	-2,209	1,831	1,659
16	-1,412	2,884	0,547

cyclohexanone α bromée
conformation bateau dissymétrique
27 variables
fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
1.2.3	111,82	13.5.4	111,15
2.3.4	112,14	13.5.6	111,15
3.4.5	112,14	14.5.4	111,15
i	44,10	14.5.6	111,15
i'	44,10	15.6.5	111,15
2.1.6	115,93	15.6.1	111,15
17.1.6	122,03	16.6.5	111,15
7.2.1	111,15	16.6.1	108,17
7.2.3	111,15	17.1.2	122,04
8.2.1	111,15	7.2.8	99,84
8.2.3	111,15	9.3.10	99,44
9.3.2	111,15	11.4.12	99,43
9.3.4	111,15	15.5.14	99,89
10.3.2	111,15	15.6.16	109,68
10.3.4	111,15	4.5.6	111,84
11.4.3	111,15	1.6.5	109,69
11.4.5	111,15		
12.4.3	111,15		
12.4.5	111,15		

Energie (Kcal/mole)	
Wa	1,150
Wb	4,203
Wd	3,997
Wdp . . .	4,052
ΣW	13,402

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	48,95	3.4.5.13	69,45
7.2.3.10	158,72	3.4.5.6	55,47
7.2.3.4	76,17	14.5.6.15	57,64
8.2.3.9	61,31	14.5.6.16	59,46
8.2.3.10	48,46	14.5.6.5	179,04
8.2.3.4	173,58	13.5.6.15	52,47
1.2.3.9	173,82	13.5.6.16	169,57
1.2.3.10	76,41	13.5.6.5	70,86
1.2.3.4	48,71	4.5.6.15	177,41
9.3.4.11	2,79	4.5.6.16	65,49
9.3.4.12	112,56	4.5.6.5	54,09
9.3.4.5	122,32	15.6.1.2	124,39
10.3.4.11	106,98	16.6.1.2	120,32
10.3.4.12	2,79	5.6.1.2	1,06
10.3.4.5	127,91	15.6.1.17	55,61
2.3.4.11	127,91	16.6.1.17	59,68
2.3.4.12	122,33	5.6.1.17	178,94
2.3.4.5	2,79	6.1.2.7	74,17
11.4.5.14	54,47	6.1.2.8	175,57
11.4.5.13	55,64	6.1.2.3	50,70
11.4.5.6	179,42	17.1.2.7	105,83
12.4.5.14	55,30	17.1.2.8	4,43
12.4.5.13	165,41	17.1.2.3	129,30
12.4.5.6	69,65		
3.4.5.14	179,59		

μ(D)	
C = O	2,8
C - Br	1,9
μ_D	4,19

FIGURE : 68

Atomes	Coordonnées (Å)		
	X	Y	Z
2	0	0	0
3	1,269	0,859	0
4	1,222	1,958	1,066
5	-0,051	1,885	1,915
6	-1,315	-1,929	1,051
1	-1,251	0,846	0
17	-2,157	0,666	-0,804
7	0	-0,699	0,830
8	0	-0,699	-0,830
9	2,186	0,225	0,113
10	1,466	1,289	-1,016
11	2,140	1,936	1,710
12	1,345	2,973	0,606
14	-0,065	2,691	2,693
13	-0,045	0,982	2,578
15	-2,209	1,831	1,659
16Br	-1,512	3,653	0,183

cyclohexanone ∝bromée

conformation bateau dissymétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
1.2.3	111,82	13.5.4	111,15
2.3.4	112,14	13.5.6	111,15
3.4.5	112,14	14.5.4	111,15
i	44,10	14.5.6	111,15
i'	44,10	15.6.5	111,15
2.1.6	115,93	15.6.1	111,15
17.1.6	122,03	16.6.5	111,15
7.2.1	111,15	16.6.1	109,29
7.2.3	111,15	17.1.2	122,04
8.2.1	111,15	7.2.8	99,84
8.2.3	111,15	9.3.10	99,44
9.3.2	111,15	11.4.12	99,43
9.3.4	111,15	15.5.14	99,74
10.3.2	111,15	15.6.16	104,30
10.3.4	111,15	4.5.6	111,84
11.4.3	111,15	1.6.5	109,69
11.4.5	111,15		
12.4.3	111,15		
12.4.5	111,15		

Energie (Kcal/mole)	
Wa	1,556
Wb	4,039
Wd	4,007
Wdp . . .	4,481
ΣW	14,082

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	48,95	3.4.5.13	69,45
7.2.3.10	158,72	3.4.5.6	55,47
7.2.3.4	76,17	14.5.6.15	57,67
8.2.3.9	61,30	14.5.6.16	58,04
8.2.3.10	48,46	14.5.6.5	179,01
8.2.3.4	173,58	13.5.6.15	52,49
1.2.3.9	173,82	13.5.6.16	168,19
1.2.3.10	76,41	13.5.6.5	70,84
1.2.3.4	48,71	4.5.6.15	177,41
9.3.4.11	2,79	4.5.6.16	66,89
9.3.4.12	112,56	4.5.6.5	54,08
9.3.4.5	122,33	15.6.1.2	124,39
10.3.4.11	106,98	16.6.1.2	121,03
10.3.4.12	2,78	5.6.1.2	1,06
10.3.4.5	127,91	15.6.1.17	55,61
2.3.4.11	127,91	16.6.1.17	58,97
2.3.4.12	122,33	5.6.1.17	178,94
2.3.4.5	27,88	6.1.2.7	74,17
11.4.5.14	54,49	6.1.2.8	175,57
11.4.5.13	55,66	6.1.2.3	50,70
11.4.5.6	179,43	17.1.2.7	105,83
12.4.5.14	55,27	17.1.2.8	4,43
12.4.5.13	165,43	17.1.2.3	129,30
12.4.5.6	69,65		
3.4.5.14	179,63		

μ(D)	
C = O	3,1
C - Br	2,2
μ_D	4,21

FIGURE : 69

Atomes	Coordonnées (Å)		
	X	Y	Z
2	0	0	0
3	1,269	0,859	0
4	1,222	1,958	1,066
5	-0,051	1,885	1,915
6	-1,315	1,929	1,051
1	-1,251	0,846	0
17	-2,157	0,666	-0,804
7	0	-0,699	0,830
8	0	-0,699	-0,830
9	2,186	0,225	0,113
10	1,466	1,289	-1,013
11	2,140	1,936	1,710
12	1,345	2,973	0,606
14	-0,065	2,690	2,693
13	-0,045	0,983	2,578
15 Br	-2,913	1,754	2,138
16	-1,409	2,882	0,541

cyclohexanone ∝ bromée
conformation bateau dissymétrique
27 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
1.2.3	111,82	13.5.4	111,15
2.3.4	112,14	13.5.6	111,15
3.4.5	112,14	14.5.4	111,15
i	44,10	14.5.6	111,15
i'	44,10	15.6.5	111,15
2.1.6	115,93	15.6.1	111,15
17.1.6	122,03	16.6.5	111,15
7.2.1	111,15	16.6.1	107,84
7.2.3	111,15	17.1.2	122,04
8.2.1	111,15	7.2.8	99,84
8.2.3	111,15	9.3.10	99,43
9.3.2	111,15	11.4.12	99,43
9.3.4	111,15	15.5.14	99,69
10.3.2	111,15	15.6.16	105,76
10.3.4	111,15	4.5.6	111,84
11.4.3	111,15	1.6.5	109,69
11.4.5	111,15		
12.4.3	111,15		
12.4.5	111,15		

Energie (Kcal/mole)	
Wa	1,163
Wb	4,127
Wd	3,994
Wdp . . .	4,417
ΣW	13,700

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	48,95	3.4.5.13	69,47
7.2.3.10	158,72	3.4.5.6	55,47
7.2.3.4	76,17	14.5.6.15	57,64
8.2.3.9	61,31	14.5.6.16	59,87
8.2.3.10	48,46	14.5.6.5	179,04
8.2.3.4	173,58	13.5.6.15	52,47
1.2.3.9	173,82	13.5.6.16	169,98
1.2.3.10	76,41	13.5.6.5	70,86
1.2.3.4	48,71	4.5.6.15	177,41
9.3.4.11	2,79	4.5.6.16	65,08
9.3.4.12	112,56	4.5.6.5	54,09
9.3.4.5	122,32	15.6.1.2	124,39
10.3.4.11	106,98	16.6.1.2	120,12
10.3.4.12	2,79	5.6.1.2	1,06
10.3.4.5	127,91	15.6.1.17	55,71
2.3.4.11	127,91	16.6.1.17	59,88
2.3.4.12	122,33	5.6.1.17	178,94
2.3.4.5	2,79	6.1.2.7	74,17
11.4.5.14	54,47	6.1.2.8	175,57
11.4.5.13	55,64	6.1.2.3	50,70
11.4.5.6	179,42	17.1.2.7	105,83
12.4.5.14	55,30	17.1.2.8	4,43
12.4.5.13	165,41	17.1.2.3	129,30
12.4.5.6	69,65		
3.4.5.14	179,59		

μ(D)	
C =O	3,1
C - Br	2,2
μ_D	4,24

FIGURE : 70

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,283	0,796	0
3	1,281	1,915	1,047
4	- 0,012	2,734	0,984
5	- 1,274	1,872	1,091
6	- 1,283	0,796	0
7	2,125	0,132	0,165
8 Br	1,581	1,552	- 1,762
9	1,550	1,178	2,799
10	2,822	3,040	0,830
11	- 0,012	3,520	1,783
12	- 0,030	3,310	0,023
13	- 1,372	1,052	2,824
14	- 2,833	2,979	0,919
15	- 2,128	0,127	0,128
16	- 1,432	1,244	0,977
17	- 0,007	1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	116,36	13.5.6	110,02
1.2.3	112,57	14.5.4	109,77
2.3.4	111,32	14.5.6	109,67
i	43,11	15.6.5	110,70
i'	45,39	15.6.1	109,65
1.6.5	111,41	16.6.5	110,58
7.2.1	109,67	16.6.1	109,57
7.2.3	110,11	17.1.6	121,49
8.2.1	109,61	17.1.2	122,15
8.2.3	109,66	7.2.8	104,93
9.3.2	110,07	9.3.10	102,45
9.3.4	111,24	11.4.12	104,55
10.3.2	110,46	13.5.14	106,57
10.3.4	111,14	15.6.16	104,71
11.4.3	110,19	4.5.6	110,53
11.4.5	110,24	3.4.5	113,04
12.4.3	108,89		
12.4.5	109,59		
13.5.4	110,20		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	47,73	3.4.5.6	56,27
6.1.2.7	170,69	3.4.5.14	177,36
6.1.2.8	74,61	3.4.5.13	65,56
17.1.2.3	132,27	11.4.5.6	180,00
17.1.2.7	9,31	11.4.5.14	58,82
17.1.2.8	105,39	11.4.5.13	58,25
1.2.3.4	48,08	12.4.5.6	65,37
1.2.3.9	75,65	12.4.5.14	55,72
1.2.3.10	171,94	12.4.5.13	172,80
7.2.3.4	170,79	4.5.6.1	52,46
7.2.3.9	47,06	4.5.6.15	174,76
7.2.3.10	65,35	4.5.6.16	69,65
8.2.3.4	74,23	13.4.5.1	69,48
8.2.3.9	162,04	13.4.5.15	52,83
8.2.3.10	49,63	13.4.5.16	168,42
2.3.4.5	53,94	14.4.5.1	173,62
2.3.4.11	177,79	14.4.5.15	64,08
2.3.4.12	68,09	14.4.5.16	51,51
9.3.4.5	69,17	5.6.1.2	49,88
9.3.4.11	54,68	16.6.1.2	72,81
9.3.4.12	168,80	15.6.1.2	172,79
10.3.4.5	177,47	15.6.1.17	7,21
10.3.4.11	58,69	16.6.1.17	107,19
10.3.4.12	55,43	5.6.1.17	130,12

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone α bromée

Br axial

conformation chaise

27 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	2,2
μ_D	3,02D

Energie (Kcal/mole)	
Wa	15,611
Wb	4,084
Wd	0,640
Wdp	3,669
ΣW	24,005
W_L	- 1,060
$\Sigma W+W_L$	22,944

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-2} kcal

FIGURE : 71

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,287	0,790	0
3	1,303	1,896	1,059
4	0,008	2,706	0,939
5	- 1,285	1,893	1,063
6	- 1,287	0,790	0
7 Br	2,812	- 0,391	0,209
8	1,418	1,243	- 0,977
9	1,480	1,118	2,805
10	2,853	3,012	0,863
11	0,007	3,539	1,690
12	0,004	3,213	- 0,061
13	- 1,411	1,103	2,809
14	- 2,813	3,032	0,837
15	- 2,119	0,108	0,142
16	- 1,449	1,216	- 0,984
17	- 0,011	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	116,93	13.5.6	109,57
1.2.3	112,74	14.5.4	110,30
2.3.4	108,59	14.5.6	110,13
i	43,75	15.6.5	111,27
i'	43,96	15.6.1	108,94
1.6.5	112,04	16.6.5	110,30
7.2.1	110,58	16.6.1	109,49
7.2.3	110,94	17.1.6	121,03
8.2.1	108,75	17.1.2	122,04
8.2.3	108,66	7.2.8	104,83
9.3.2	109,68	9.3.10	104,71
9.3.4	111,35	11.4.12	105,17
10.3.2	110,94	13.5.14	107,39
10.3.4	111,54	15.6.16	104,55
11.4.3	109,91	4.5.6	109,10
11.4.5	109,82	3.4.5	115,21
12.4.3	108,15		
12.4.5	108,07		
13.5.4	110,34		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	48,57	3.4.5.6	57,14
6.1.2.7	173,41	3.4.5.14	178,21
6.1.2.8	72,00	3.4.5.13	63,28
17.1.2.3	131,43	11.4.5.6	178,12
17.1.2.7	6,59	11.4.5.14	57,03
17.1.2.8	108,00	11.4.5.13	61,46
1.2.3.4	49,54	12.4.5.6	63,91
1.2.3.9	72,34	12.4.5.14	57,18
1.2.3.10	172,47	12.4.5.13	175,68
7.2.3.4	174,18	4.5.6.1	49,93
7.2.3.9	52,30	4.5.6.15	172,15
7.2.3.10	62,89	4.5.6.16	72,28
8.2.3.4	71,08	13.4.5.1	70,97
8.2.3.9	167,03	13.4.5.15	51,25
8.2.3.10	51,85	13.4.5.16	166,82
2.3.4.5	56,62	14.4.5.1	171,12
2.3.4.11	178,69	14.4.5.15	66,66
2.3.4.12	64,38	14.4.5.16	48,91
9.3.4.5	64,24	5.6.1.2	48,49
9.3.4.11	60,45	16.6.1.2	74,20
9.3.4.12	174,76	15.6.1.2	172,04
10.3.4.5	179,17	15.6.1.17	7,96
10.3.4.11	56,13	16.6.1.17	105,80
10.3.4.12	58,18	5.6.1.17	131,51

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone α bromée

Br éq.

conformation chaise

27 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br	1,9
μ_D	4,28D

Energie (Kcal/mole)	
Wa	14,650
Wb	3,732
Wd	0,512
Wdp	4,097
ΣW	22,992
W_L	- 0,125
$\Sigma W+W_L$	22,867

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

FIGURE : 72

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,283	0,797	0
3	1,286	1,910	1,052
4	0,019	1,873	1,914
5	-1,269	1,879	1,084
6	-1,283	0,797	0
7	2,134	0,140	0,145
8 Br	1,609	1,540	-1,762
9	2,841	1,760	2,167
10	1,456	3,624	0,203
11	0,038	0,963	2,576
12	0,024	2,746	2,627
13	-2,783	1,652	2,242
14	-1,512	3,605	0,280
15	-2,128	0,134	0,152
16	-1,430	1,254	-0,973
17	-0,024	-1,225	0

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone
bromée (Br ax)
conformation bateau symétrique
27 variables
fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	116,29	13.5.6	109,65
1.2.3	112,66	14.5.4	109,69
2.3.4	111,53	14.5.6	109,71
i	43,38	15.6.5	109,86
i'	45,06	15.6.1	109,85
1.6.5	111,41	16.6.5	109,77
7.2.1	110,27	16.6.1	109,76
7.2.3	110,30	17.1.6	120,73
8.2.1	110,17	17.1.2	122,98
8.2.3	110,20	7.2.8	102,81
9.3.2	110,09	9.3.10	104,76
9.3.4	109,99	11.4.12	104,68
10.3.2	110,19	13.5.14	105,01
10.3.4	110,14	15.6.16	106,06
11.4.3	109,76	4.5.6	112,84
11.4.5	109,72	3.4.5	112,86
12.4.3	109,59		
12.4.5	110,17		
13.5.4	109,64		

Energie (Kcal/mole)	
Wa	24,042
Wb	4,038
Wd	5,913
Wdp	3,652
ΣW	37,645
W_L	-0,507
$\Sigma W+W_L$	37,138

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,02 kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	48,10	3.4.5.6	51,80
6.1.2.7	171,18	3.4.5.14	70,85
6.1.2.8	75,40	3.4.5.13	174,32
17.1.2.3	131,90	11.4.5.6	70,85
17.1.2.7	8,20	11.4.5.14	166,50
17.1.2.8	104,60	11.4.5.13	51,67
1.2.3.4	4,09	12.4.5.6	174,51
1.2.3.9	126,42	12.4.5.14	51,86
1.2.3.10	118,53	12.4.5.13	62,96
7.2.3.4	119,59	4.5.6.1	1,05
7.2.3.9	2,73	4.5.6.15	120,90
7.2.3.10	117,79	4.5.6.16	122,84
8.2.3.4	127,58	13.4.5.1	123,58
8.2.3.9	110,09	13.4.5.15	1,62
8.2.3.10	4,96	13.4.5.16	114,63
2.3.4.5	53,13	14.4.5.1	121,58
2.3.4.11	69,50	14.4.5.15	116,46
2.3.4.12	176,17	14.4.5.16	0,18
9.3.4.5	175,55	5.6.1.2	49,49
9.3.4.11	52,92	16.6.1.2	72,30
9.3.4.12	61,42	15.6.1.2	171,45
10.3.4.5	69,52	15.6.1.17	8,54
10.3.4.11	167,85	16.6.1.17	107,70
10.3.4.12	53,51	5.6.1.17	130,51

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	2,2
μ_D	3,04

FIGURE : 73

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,285	0,794	0
3	1,291	1,911	1,048
4	0,020	1,861	1,901
5	-1,276	1,876	1,084
6	-1,285	0,794	0
7 Br	2,803	-0,385	0,262
8	1,470	1,205	-0,987
9	2,841	1,754	2,171
10	1,448	3,623	0,193
11	0,045	0,954	2,568
12	0,024	2,714	2,635
13	-2,779	1,631	2,253
14	-1,513	3,602	0,278
15	-2,129	0,128	0,150
16	-1,434	1,250	-0,973
17	-0,021	-1,225	0

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone
α-bromée (Br eq)
conformation bateau symétrique
27 variables
fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	116,59	13.5.6	109,65
1.2.3	112,77	14.5.4	109,70
2.3.4	110,71	14.5.6	109,72
i	43,18	15.6.5	109,87
i'	45,05	15.6.1	109,85
1.6.5	111,50	16.6.5	109,78
7.2.1	110,27	16.6.1	109,76
7.2.3	110,32	17.1.6	120,73
8.2.1	110,16	17.1.2	122,68
8.2.3	110,19	7.2.8	102,68
9.3.2	110,12	9.3.10	105,53
9.3.4	109,98	11.4.12	102,98
10.3.2	110,24	13.5.14	105,89
10.3.4	110,14	15.6.16	105,95
11.4.3	109,78	4.5.6	112,05
11.4.5	110,13	3.4.5	113,88
12.4.3	109,67		
12.4.5	110,18		
13.5.4	109,64		

Energie (Kcal/mole)	
Wa	23,718
Wb	3,779
Wd	5,899
Wdp	4,098
ΣW	37,493
W_L	-0,212
$\Sigma W+W_L$	37,281

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,1 kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	47,91	3.4.5.6	52,29
6.1.2.7	171,72	3.4.5.14	69,83
6.1.2.8	75,65	3.4.5.13	174,28
17.1.2.3	132,09	11.4.5.6	71,32
17.1.2.7	8,28	11.4.5.14	166,56
17.1.2.8	104,35	11.4.5.13	50,68
1.2.3.4	4,29	12.4.5.6	175,85
1.2.3.9	126,13	12.4.5.14	53,72
1.2.3.10	117,83	12.4.5.13	62,16
7.2.3.4	119,49	4.5.6.1	0,88
7.2.3.9	2,35	4.5.6.15	121,14
7.2.3.10	118,39	4.5.6.16	122,74
8.2.3.4	127,84	13.4.5.1	122,88
8.2.3.9	110,32	13.4.5.15	0,85
8.2.3.10	5,72	13.4.5.16	115,27
2.3.4.5	53,83	14.4.5.1	121,22
2.3.4.11	69,97	14.4.5.15	116,75
2.3.4.12	177,66	14.4.5.16	0,62
9.3.4.5	175,75	5.6.1.2	49,52
9.3.4.11	51,95	16.6.1.2	72,34
9.3.4.12	60,42	15.6.1.2	171,56
10.3.4.5	68,35	15.6.1.17	8,44
10.3.4.11	167,85	16.6.1.17	107,66
10.3.4.12	55,48	5.6.1.17	130,48

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br	1,9
μ_D	4,23

FIGURE : 74

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,293	0,779	0
3	1,099	2,158	- 0,638
4	0,013	2,950	0,097
5	- 1,146	2,141	0,686
6	- 1,293	0,779	0
7 Br	2,038	0,926	1,785
8	2,036	0,219	- 0,558
9	2,761	3,120	- 0,611
10	0,667	1,955	- 2,497
11	0,481	3,569	0,906
12	- 0,384	3,745	- 0,587
13	- 0,919	1,885	2,575
14	- 2,790	3,120	0,523
15	- 2,071	0,192	0,479
16	- 1,632	0,912	- 1,022
17	- 0,001	1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	117,88	13.5.6	109,48
1.2.3	110,86	14.5.4	110,23
2.3.4	110,83	14.5.6	109,47
i	24,60	15.6.5	110,60
i'	26,61	15.6.1	109,55
1.6.5	112,11	16.6.5	110,06
7.2.1	111,58	16.6.1	109,31
7.2.3	111,32	17.1.6	121,00
8.2.1	108,66	17.1.2	121,13
8.2.3	109,76	7.2.8	104,44
9.3.2	109,60	9.3.10	105,14
9.3.4	110,39	11.4.12	101,38
10.3.2	109,64	13.5.14	104,66
10.3.4	111,09	15.6.16	104,96
11.4.3	109,61	4.5.6	111,73
11.4.5	109,27	3.4.5	116,61
12.4.3	108,95		
12.4.5	109,94		
13.5.4	111,04		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	26,45	3.4.5.6	21,63
6.1.2.7	98,24	3.4.5.14	143,58
6.1.2.8	147,15	3.4.5.13	100,91
17.1.2.3	153,55	11.4.5.6	146,58
17.1.2.7	81,76	11.4.5.14	91,47
17.1.2.8	32,85	11.4.5.13	24,04
1.2.3.4	57,65	12.4.5.6	102,99
1.2.3.9	179,73	12.4.5.14	18,96
1.2.3.10	65,34	12.4.5.13	134,47
7.2.3.4	67,18	4.5.6.1	53,24
7.2.3.9	54,90	4.5.6.15	175,83
7.2.3.10	169,82	4.5.6.16	68,66
8.2.3.4	177,70	13.4.5.1	70,19
8.2.3.9	60,22	13.4.5.15	52,40
8.2.3.10	54,71	13.4.5.16	167,92
2.3.4.5	33,19	14.4.5.1	175,62
2.3.4.11	91,58	14.4.5.15	61,79
2.3.4.12	158,31	14.4.5.16	53,73
9.3.4.5	154,81	5.6.1.2	28,91
9.3.4.11	30,04	16.6.1.2	93,41
9.3.4.12	80,07	15.6.1.2	152,09
10.3.4.5	88,96	15.6.1.17	27,91
10.3.4.11	146,26	16.6.1.17	86,59
10.3.4.12	36,15	5.6.1.17	151,09

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone α bromée

Br ax

conformation croisée

27 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	2,2
μ_D	3,66D

Energie (Kcal/mole)	
Wa	19,023
Wb	4,786
Wd	4,194
Wdp	3,920
ΣW	31,924
W_L	- 0,506
$\Sigma W+W_L$	31,418

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,01 kcal

FIGURE : 75

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,300	0,769	0
3	1,275	2,180	- 0,595
4	- 0,080	2,948	- 0,228
5	- 1,135	2,140	0,669
6	- 1,300	0,769	0
7	1,619	0,822	1,035
8 Br	2,685	- 0,303	- 0,834
9	2,796	3,199	- 0,013
10	1,399	2,047	- 2,506
11	0,158	3,903	0,310
12	- 0,609	3,227	- 1,175
13	- 0,546	2,020	2,487
14	- 2,799	3,097	0,669
15	- 2,051	0,176	0,512
16	- 1,640	0,881	- 1,024
17	- 0,006	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	118,78	13.5.6	112,86
1.2.3	117,09	14.5.4	111,83
2.3.4	112,49	14.5.6	110,73
i	22,85	15.6.5	111,04
i'	25,66	15.6.1	108,53
1.6.5	111,28	16.6.5	110,48
7.2.1	106,18	16.6.1	108,83
7.2.3	109,28	17.1.6	120,34
8.2.1	109,45	17.1.2	120,88
8.2.3	110,71	7.2.8	103,11
9.3.2	111,00	9.3.10	106,68
9.3.4	113,46	11.4.12	107,04
10.3.2	108,76	13.5.14	107,09
10.3.4	111,52	15.6.16	106,53
11.4.3	114,61	4.5.6	106,37
11.4.5	112,23	3.4.5	116,35
12.4.3	113,68		
12.4.5	111,10		
13.5.4	114,24		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	25,86	3.4.5.6	49,12
6.1.2.7	96,45	3.4.5.14	168,42
6.1.2.8	152,88	3.4.5.13	74,01
17.1.2.3	154,14	11.4.5.6	172,82
17.1.2.7	83,56	11.4.5.14	67,88
17.1.2.8	27,12	11.4.5.13	49,69
1.2.3.4	38,15	12.4.5.6	72,63
1.2.3.9	161,53	12.4.5.14	46,67
1.2.3.10	81,39	12.4.5.13	164,24
7.2.3.4	82,54	4.5.6.1	62,52
7.2.3.9	40,83	4.5.6.15	176,47
7.2.3.10	157,91	4.5.6.16	58,49
8.2.3.4	164,55	13.4.5.1	59,44
8.2.3.9	72,07	13.4.5.15	61,57
8.2.3.10	45,01	13.4.5.16	179,57
2.3.4.5	0	14.4.5.1	179,48
2.3.4.11	122,56	14.4.5.15	58,47
2.3.4.12	120,48	14.4.5.16	59,51
9.3.4.5	123,79	5.6.1.2	27,69
9.3.4.11	122,83	16.6.1.2	94,28
9.3.4.12	115,74	15.6.1.2	150,17
10.3.4.5	119,73	15.6.1.17	29,83
10.3.4.11	117,72	16.6.1.17	85,72
10.3.4.12	0,740	5.6.1.17	152,31

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone α bromée

Br eq.

conformation bateau déformé

27 variables

fonctions du tableau 8

μ(D)	
C = O	2,8
C - Br	1,9
μ_D	4,16D

Energie (Kcal/mole)	
Wa	16,612
Wb	5,296
Wd	4,539
Wdp	4,043
ΣW	30,491
W_L	- 0,126
$\Sigma W+W_L$	30,365

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	$5\ 10^{-3}$ kcal

FIGURE : 76

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
2	0	0	0
3	1,266	0,863	0
4	1,205	1,983	1,043
5	- 0,054	1,973	1,916
6	- 1,336	1,902	1,080
1	- 1,248	0,851	0
17	- 2,132	0,689	- 0,833
7Br	- 0,017	- 1,449	1,290
8	0,011	- 0,581	- 0,916
9	2,790	- 0,264	0,305
10	1,463	1,594	- 1,765
11	2,123	1,978	1,686
12	1,298	2,995	0,569
14	- 0,109	3,652	2,853
13	- 0,006	0,618	3,277
15	- 2,211	1,701	1,690
16	- 1,525	2,865	0,616

Angles (d°)			
1.2.3.	111,43	13.5.4	107,19
2.3.4.	112,28	13.5.6	106,45
3.4.5	114,57	14.5.4	112,82
i	42,91	14.5.6	112,04
i'	45,67	15.6.5	112,10
2.1.6	116,15	15.6.1	108,70
17.1.6	122,38	16.6.5	109,75
7.2.1	114,42	16.6.1	108,79
7.2.3	115,34	17.1.2	121,48
8.2.1	108,05	7.2.8	99,31
8.2.3	107,06	9.3.10	106,74
9.3.2	108,97	11.4.12	100,29
9.3.4	110,66	13.5.14	105,73
10.3.4	110,58	15.6.16	105,30
11.4.3	110,78	4.5.6	112,16
11.4.5	110,24	1.6.5	111,94
12.4.3	111,62		
12.4.5	108,39		
10.3.2	107,41		

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	37,69	3.4.5.13	76,51
7.2.3.10	152,97	3.4.5.6	51,09
7.2.3.4	85,26	14.5.6.15	74,23
8.2.3.9	71,73	14.5.6.16	42,42
8.2.3.10	43,55	14.5.6.5	163,32
8.2.3.4	165,31	13.5.6.15	40,87
1.2.3.9	170,33	13.5.6.16	157,51
1.2.3.10	74,39	13.5.6.5	81,58
1.2.3.4	47,37	4.5.6.15	168,89
9.3.4.11	6,57	4.5.6.16	74,47
9.3.4.12	117,43	4.5.6.5	46,44
9.3.4.5	118,90	15.6.1.2	119,63
10.3.4.11	111,48	16.6.1.2	126,20
10.3.4.12	0,62	5.6.1.2	4,74
10.3.4.5	123,04	15.6.1.17	60,37
2.3.4.11	128,58	16.6.1.17	53,80
2.3.4.12	120,57	5.6.1.17	175,26
2.3.4.5	3,099	6.1.2.7	80,26
11.4.5.14	66,71	6.1.2.8	170,17
11.4.5.13	49,24	6.1.2.3	52,83
11.4.5.6	176,85	17.1.2.7	99,74
12.4.5.14	42,15	17.1.2.8	9,83
12.4.5.13	158,11	17.1.2.3	127,17
12.4.5.6	74,29		
3.4.5.14	167,54		

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone α bromée (Br eq)

conformation bateau dissymétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa	23,748
Wb	7,092
Wd	5,016
Wdp	3,555
ΣW	39,412
W_L	- 0,275
$\Sigma W+W_L$	39,137

μ(D)	
C = O	2,8
C - Br	1,3
μ_D	3,12D

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,02 kcal

FIGURE : 77

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
2	0	0	0
3	1,271	0,856	0
4	1,243	1,951	1,071
5	- 0,053	1,938	1,889
6	- 1,336	1,923	1,053
1	- 1,253	0,843	0
17	- 2,150	0,658	- 0,813
7	0	- 0,701	0,828
8	0	- 0,700	- 0,828
9	2,841	- 0,237	0,168
10	1,607	1,597	- 1,739
11	2,142	1,888	1,737
12	1,427	2,961	3,172
14	- 0,086	3,356	3,172
13	- 0,041	0,300	3,177
15	- 2,211	1,790	1,681
16Br	- 1,671	3,657	0,252

Angles (d°)			
1.2.3.	112,10	13.5.4	111,23
2.3.4.	112,57	13.5.6	111,23
3.4.5	112,53	14.5.4	111,17
i	44,36	14.5.6	111,17
i'	44,20	15.6.5	111,15
2.1.6	116,43	15.6.1	111,15
17.1.6	122,03	16.6.5	111,15
7.2.1	111,16	16.6.1	111,15
7.2.3	111,17	17.1.2	121,53
8.2.1	111,15	7.2.8	99,48
8.2.3	111,15	9.3.10	98,95
9.3.2	111,14	11.4.12	98,96
9.3.4	111,15	13.5.14	115,60
10.3.4	111,14	15.6.16	102,07
11.4.3	111,15	4.5.6	114,63
11.4.5	111,15	1.6.5	109,97
12.4.3	111,15		
12.4.5	111,15		
10.3.2	111,14		

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	49,52	3.4.5.13	68,92
7.2.3.10	158,70	3.4.5.6	50,57
7.2.3.4	75,89	14.5.6.15	70,69
8.2.3.9	60,30	14.5.6.16	42,27
8.2.3.10	48,87	14.5.6.5	165,79
8.2.3.4	174,28	13.5.6.15	53,45
1.2.3.9	174,63	13.5.6.16	166,41
1.2.3.10	76,20	13.5.6.5	70,07
1.2.3.4	49,21	4.5.6.15	172,94
9.3.4.11	0,193	4.5.6.16	74,09
9.3.4.12	108,96	4.5.6.5	49,43
9.3.4.5	125,63	15.6.1.2	121,80
10.3.4.11	109,41	16.6.1.2	125,24
10.3.4.12	0,153	5.6.1.2	1,71
10.3.4.5	125,19	15.6.1.17	58,20
2.3.4.11	125,18	16.6.1.17	54,76
2.3.4.12	125,62	5.6.1.17	178,29
2.3.4.5	0,177	6.1.2.7	73,98
11.4.5.14	67,66	6.1.2.8	176,20
11.4.5.13	56,48	6.1.2.3	51,13
11.4.5.6	175,98	17.1.2.7	106,02
12.4.5.14	41,54	17.1.2.8	3,80
12.4.5.13	165,68	17.1.2.3	128,87
12.4.5.6	74,83		
3.4.5.14	166,94		

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone α bromée

conformation bateau dissymétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa	19,555
Wb	7,378
Wd	4,319
Wdp	4,434
ΣW	35,686
W_L	- 0,472
$\Sigma W+W_L$	35,214

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	2,2
μ_D	4,25D

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20'
ΔW	0,1 kcal

FIGURE : 78

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
2	0	0	0
3	1,271	0,856	0
4	1,242	1,951	1,071
5	- 0,053	1,938	1,889
6	- 1,336	1,923	1,053
1	- 1,253	0,843	0
17	- 2,150	0,658	- 0,813
7	0	- 0,701	0,828
8	0	- 0,701	- 0,828
9	2,841	- 0,237	0,168
10	1,607	1,597	- 1,739
11	2,142	1,888	1,737
12	1,427	2,961	0,622
14	- 0,083	3,538	3,143
13	- 0,045	0,139	3,081
15Br	- 2,901	1,686	2,175
16	- 1,523		

Angles (d°)			
1.2.3.	112,10	13.5.4	111,23
2.3.4.	112,57	13.5.6	111,23
3.4.5	112,53	14.5.4	111,17
i	44,36	14.5.6	111,17
i'	44,20	15.6.5	111,15
2.1.6	116,43	15.6.1	111,15
17.1.6	122,03	16.6.5	111,15
7.2.1	111,16	16.6.1	111,14
7.2.3	111,17	17.1.2	121,54
8.2.1	111,15	7.2.8	99,48
8.2.3	111,15	9.3.10	98,96
9.3.2	111,14	11.4.12	98,97
9.3.4	111,15	13.5.14	107,51
10.3.4	111,14	15.6.16	102,08
11.4.3	111,15	4.5.6	114,63
11.4.5	111,15	1.6.5	109,97
12.4.3	111,15		
12.4.5	111,15		
10.3.2	111,14		

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	49,52	3.4.5.13	73,47
7.2.3.10	158,69	3.4.5.6	50,59
7.2.3.4	75,90	14.5.6.15	67,72
8.2.3.9	60,30	14.5.6.16	45,25
8.2.3.10	48,87	14.5.6.5	168,76
8.2.3.4	174,28	13.5.6.15	48,90
1.2.3.9	174,62	13.5.6.16	161,87
1.2.3.10	76,20	13.5.6.5	74,62
1.2.3.4	49,21	4.5.6.15	172,95
9.3.4.11	0,20	4.5.6.16	74,07
9.3.4.12	108,98	4.5.6.5	49,44
9.3.4.5	125,63	15.6.1.2	121,81
10.3.4.11	109,40	16.6.1.2	125,22
10.3.4.12	0,16	5.6.1.2	1,708
10.3.4.5	125,20	15.6.1.17	58,19
2.3.4.11	125,19	16.6.1.17	54,78
2.3.4.12	125,61	5.6.1.17	178,29
2.3.4.5	0,19	6.1.2.7	73,98
11.4.5.14	64,69	6.1.2.8	176,20
11.4.5.13	51,93	6.1.2.3	51,12
11.4.5.6	175,99	17.1.2.7	106,02
12.4.5.14	44,51	17.1.2.8	3,80
12.4.5.13	161,13	17.1.2.3	128,88
12.4.5.6	74,81		
3.4.5.14	169,91		

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone α bromée

conformation bateau dissymétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

μ(D)	
C = O	3,1
C - Br	2,2
μ_D	4,30D

Energie (kcal/mole)	
Wa	17,68
Wb	7,545
Wd	4,360
Wdp	4,365
ΣW	33,946
W_L	- 0,180
$\Sigma W+W_L$	33,766

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20'
ΔW	1 kcal

FIGURE : 79

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
2	0	0	0
3	1,265	0,864	0
4	1,257	2,011	1,016
5	- 0,035	2,036	1,839
6	- 1,296	2,013	0,965
1	- 1,247	0,852	0
17	- 2,180	0,607	- 0,755
7	- 0,001	- 0,716	0,815
8 Br	- 0,011	- 1,279	- 1,459
9	2,801	- 0,252	0,283
10	1,540	1,579	- 1,761
11	2,118	1,950	1,733
12	1,409	2,998	0,507
14	- 0,070	3,636	2,903
13	- 0,071	0,647	3,169
15	- 2,177	1,945	1,591
16	- 1,407	2,951	0,432

Angles (d°)			
1.2.3.	111,30	13.5.4	109,04
2.3.4.	114,72	13.5.6	108,29
3.4.5	111,86	14.5.4	112,08
i	41,56	14.5.6	111,65
i'	39,72	15.6.5	109,90
2.1.6	117,33	15.6.1	110,23
17.1.6	121,60	16.6.5	110,68
7.2.1	111,81	16.6.1	110,71
7.2.3	111,91	17.1.2	121,07
8.2.1	111,54	7.2.8	97,47
8.2.3	112,14	9.3.10	103,71
9.3.2	109,42	11.4.12	103,54
9.3.4	109,95	13.5.14	102,57
10.3.4	109,32	15.6.16	104,64
11.4.3	112,32	4.5.6	112,74
11.4.5	107,79	1.6.5	110,53
12.4.3	110,89		
12.4.5	110,11		
10.3.2	109,15		

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	45,09	3.4.5.13	75,13
7.2.3.10	157,95	3.4.5.6	51,78
7.2.3.4	78,99	14.5.6.15	64,19
8.2.3.9	63,26	14.5.6.16	50,90
8.2.3.10	49,60	14.5.6.5	173,93
8.2.3.4	172,66	13.5.6.15	47,98
1.2.3.9	171,00	13.5.6.16	163,07
1.2.3.10	76,14	13.5.6.5	73,91
1.2.3.4	46,92	4.5.6.15	175,12
9.3.4.11	1,88	4.5.6.16	69,80
9.3.4.12	113,43	4.5.6.5	53,23
9.3.4.5	123,24	15.6.1.2	125,00
10.3.4.11	115,11	16.6.1.2	119,70
10.3.4.12	163,13	5.6.1.2	3,30
10.3.4.5	123,53	15.6.1.17	55,00
2.3.4.11	121,92	16.6.1.17	60,30
2.3.4.12	122,77	5.6.1.17	176,70
2.3.4.5	0,56	6.1.2.7	79,97
11.4.5.14	64,01	6.1.2.8	172,06
11.4.5.13	48,82	6.1.2.3	46,00
11.4.5.6	175,73	17.1.2.7	100,03
12.4.5.14	48,27	17.1.2.8	7,94
12.4.5.13	161,10	17.1.2.3	134,00
12.4.5.6	72,00		
3.4.5.14	172,04		

tetraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone α bromée

conformation bateau dissymétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br	1,9
μ_D	4,22D

Energie (kcal/mole)	
Wa	19,546
Wb	7,706
Wd	4,415
Wdp	4,036
ΣW	35,702
W_L	- 0,107
$\Sigma W+W_L$	35,595

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,1kcal

FIGURE : 80

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,277	0,805	0
3	1,271	1,856	1,115
4	0	2,711	1,092
5	- 1,271	1,856	1,115
6	- 1,277	0,805	0
7 Br	2,851	- 0,327	0,076
8	1,440	1,270	- 0,967
9	1,414	1,378	2,117
10	2,191	2,493	1,079
11	0	3,462	1,923
12	0	3,407	0,214
13	- 1,414	1,378	2,117
14	- 2,191	2,493	1,079
15 Br	- 2,851	- 0,327	0,076
16	- 1,440	1,270	- 0,967
17	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	115,55
1.2.3	111,23
2.3.4	112,04
3.4.5	112,11
7.2.1	111,26
8.2.1	112,03
9.3.2	110,96
10.3.2	110,81
11.4.3	111,32
12.4.3	111,00
17.1.2	122,23

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 4,266
Wb . .	0,616
Wd . .	2,952
Wdp. .	7,004
ΣW . .	6,306

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	10^{-3} kcal

cis dibromo-2,6 cyclohexanone

bromes diéquatoriaux

conformation chaise

10 variables

fonctions C--C $16600\ e^{-3,63r} - 325/r^6$

C--H $30000\ e^{-4,17r} - 140/r^6$

H--H $10000\ e^{-4,6r} - 49,2/r^6$

fonctions C--CO, H--CO du tableau 8

Br--H $- 2,25x0,136\ (3,28/r)^6 + 8,28 \cdot 10^5 x0,136\ e^{-r/(0,0736.3,28)}$

Br--Br $- 2,25x0,434\ (3,86/r)^6 + 8,28 \cdot 10^5 x0,434\ e^{-r/(0,0736.3,86)}$

Br--C $- 2,25x0,215\ (3,63/r)^6 + 8,28 \cdot 10^5 x0,215\ e^{-r/(0,0736.3,63)}$

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br	1,7
μ_D	4,59D

FIGURE : 81

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,277	0,806	0
3	1,270	1,854	1,118
4	0	2,710	1,099
5	- 1,270	1,854	1,118
6	- 1,277	0,806	0
7 Br	2,852	- 0,323	0,068
8	1,437	1,274	- 0,966
9	1,415	1,373	2,119
10	2,191	2,491	1,084
11	0	3,455	1,936
12	0	3,411	0,226
13	- 1,415	1,373	2,119
14	- 2,191	2,491	1,084
15 Br	- 2,852	- 3,230	0,068
16	- 1,437	1,274	- 0,966
17	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	115,44
1.2.3	111,20
2.3.4	112,12
3.4.5	112,05
7.2.1	112,08
8.2.1	110,80
9.3.2	110,96
10.3.2	111,31
11.4.3	111,25
12.4.3	111,04
17.1.2	122,25

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	2,42
17.1.2.8	107,57

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 2,084
Wb . .	0,626
Wd . .	2,952
Wdp. .	6,994
ΣW . .	8,489

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br	1,7
μ_D	4,58D

cis dibromo-2,6 cyclohexanone

bromes diéquatoriaux

conformation chaise

10 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$

fonctions : C---Br, H---Br, C---C=O, H---CO, Br---Br du tableau 8

FIGURE : 82

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,278	0,805	0
3	1,264	1,812	1,154
4	0	2,678	1,131
5	- 1,264	1,812	1,154
6	- 1,278	0,805	0
7 Br	2,821	- 0,364	0,132
8	1,361	1,341	- 0,940
9	1,312	1,258	2,127
10	2,173	2,463	1,104
11	0	3,374	2,008
12	0	3,309	0,205
13	- 1,312	1,258	2,127
14	- 2,173	2,463	1,104
15 Br	- 2,821	- 0,364	0,132
16	- 1,361	1,341	- 0,940
17	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	115,60
1.2.3	110,03
2.3.4	111,56
3.4.5	111,14
11.4.3	109,84
7.2.1	110,61
9.3.2	109,18
8.2.1	109,17
10.3.2	109,91
12.4.3	109,35
17.1.2	122,20
7.2.8	107,18
9.3.10	106,98
11.4.12	107,23

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	4,16
17.1.2.3	126,68
17.1.2.8	113,54
6.1.2.7	175,83
6.1.2.3	53,32
6.1.2.8	66,46
7.2.3.9	55,02
7.2.3.4	175,78
7.2.3.10	62,04
1.2.3.9	67,49
1.2.3.4	53,26
1.2.3.10	175,45
8.2.3.9	172,73
8.2.3.10	55,67
9.3.4.5	64,73
9.3.4.12	174,44
9.3.4.11	57,03
2.3.4.5	56,02
2.3.4.12	64,80
2.3.4.11	177,79
10.3.4.5	178,21
10.3.4.12	57,38
10.3.4.11	60,03
8.2.3.4	66,52

Energie (kcal/mole)	
Wa	1,235
Wb	0,240
Wd	0,205
Wdp. . . .	7,223
ΣW	8,902
W_L	- 2,436
ΣW + W_L . .	6,466

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	10^{-2} kcal

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br	1,7
μ_D	4,65D

cis dibromo-2,6 cyclohexanone

bromes diéquatoriaux

conformation chaise

10 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 83

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,284	0,795	0
3	1,264	1,867	1,094
4	0,011	2,740	0,980
5	- 1,259	1,888	1,073
6	- 1,284	0,795	0
7 Br	2,815	- 0,371	0,247
8	1,405	1,271	- 0,968
9	1,283	1,375	2,102
10	2,186	2,500	1,017
11	0,009	3,512	1,793
12	0,024	3,292	0,004
13	- 1,309	1,411	2,087
14	- 2,164	2,542	0,969
15 Br	- 2,815	- 0,364	0,274
16	- 1,412	1,253	- 0,975
17	- 0,006	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	116,46	13.5.6	109,21
1.2.3	110,94	14.5.4	109,78
2.3.4	110,85	14.5.6	109,78
i	45,59	15.6.5	109,86
i'	44,47	15.6.1	110,89
1.6.5	111,22	16.6.5	109,30
7.2.1	110,76	16.6.1	108,82
7.2.3	109,86	17.1.6	121,50
8.2.1	109,02	17.1.2	122,04
8.2.3	109,39	7.2.8	106,77
9.3.2	109,56	9.3.10	107,20
9.3.4	109,34	11.4.12	106,96
10.3.2	109,58	13.5.14	107,21
10.3.4	110,25	15.6.16	106,62
11.4.3	109,81	4.5.6	111,56
11.4.5	109,77	3.4.5	110,87
12.4.3	109,65		
12.4.5	109,69		
13.5.4	109,19		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	49,90	3.4.5.6	57,10
6.1.2.7	172,18	3.4.5.14	179,02
6.1.2.8	70,62	3.4.5.13	63,72
17.1.2.3	130,10	11.4.5.6	178,60
17.1.2.7	7,82	11.4.5.14	59,49
17.1.2.8	109,38	11.4.5.13	57,78
1.2.3.4	53,22	12.4.5.6	64,15
1.2.3.9	67,53	12.4.5.14	57,77
1.2.3.10	175,12	12.4.5.13	175,04
7.2.3.4	176,02	4.5.6.1	51,08
7.2.3.9	55,27	4.5.6.15	174,24
7.2.3.10	62,08	4.5.6.16	69,10
8.2.3.4	67,08	13.4.5.1	69,72
8.2.3.9	172,17	13.4.5.15	53,45
8.2.3.10	54,82	13.4.5.16	170,10
2.3.4.5	58,08	14.4.5.1	173,00
2.3.4.11	179,57	14.4.5.15	63,84
2.3.4.12	63,19	14.4.5.16	52,82
9.3.4.5	62,80	5.6.1.2	48,72
9.3.4.11	58,67	16.6.1.2	71,74
9.3.4.12	175,93	15.6.1.2	171,29
10.3.4.5	179,62	15.6.1.17	8,71
10.3.4.11	58,93	16.6.1.17	108,26
10.3.4.12	58,32	5.6.1.17	131,28

Energie (Kcal/mole)	
Wa	1,246
Wb	0,252
Wd	0,310
Wdp	7,242
ΣW	9,050
W_L	- 2,357
ΣW+W_L	6,693

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

cyclohexanone αα' dibromée

isomère cis

bromes diequatoriaux

conformation chaise

27 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br_7	1,7
C - Br_{15}	1,7
μ_D	4,67D

FIGURE : 84

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,286	0,791	0
3	1,274	1,898	1,059
4	0,002	2,748	0,988
5	- 1,259	1,882	1,075
6	- 1,286	0,791	0
7 Br	- 2,801	- 0,383	0,303
8	1,430	1,235	- 0,980
9	1,348	1,430	2,075
10	2,170	2,558	0,928
11	0,002	3,493	1,825
12	- 0,007	3,324	0,026
13	- 1,307	1,403	2,087
14	- 2,168	2,530	0,975
15	- 2,119	0,121	0,188
16 Br	- 1,581	1,582	- 1,746
17	- 0,008	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	116,83	13.5.6	109,17
1.2.3	111,81	14.5.4	109,59
2.3.4	112,06	14.5.6	109,58
i	43,74	15.6.5	109,39
i'	44,56	15.6.1	109,27
1.6.5	110,97	16.6.5	110,10
7.2.1	110,39	16.6.1	110,07
7.2.3	109,60	17.1.6	121,21
8.2.1	109,09	17.1.2	121,96
8.2.3	109,26	7.2.8	106,56
9.3.2	108,94	9.3.10	107,43
9.3.4	109,20	11.4.12	107,44
10.3.2	109,76	13.5.14	107,01
10.3.4	109,35	15.6.16	106,94
11.4.3	109,50	4.5.6	112,17
11.4.5	109,48	3.4.5	111,52
12.4.3	109,36		
12.4.5	109,46		
13.5.4	109,18		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	48,13	3.4.5.6	55,62
6.1.2.7	170,41	3.4.5.14	177,59
6.1.2.8	72,83	3.4.5.13	65,51
17.1.2.3	131,87	11.4.5.6	176,96
17.1.2.7	9,59	11.4.5.14	61,09
17.1.2.8	107,17	11.4.5.13	55,82
1.2.3.4	49,74	12.4.5.6	65,52
1.2.3.9	71,20	12.4.5.14	56,44
1.2.3.10	171,43	12.4.5.13	173,34
7.2.3.4	172,46	4.5.6.1	51,35
7.2.3.9	51,52	4.5.6.15	171,99
7.2.3.10	65,85	4.5.6.16	70,76
8.2.3.4	71,12	13.4.5.1	69,79
8.2.3.9	167,94	13.4.5.15	50,85
8.2.3.10	50,56	13.4.5.16	168,10
2.3.4.5	54,54	14.4.5.1	173,32
2.3.4.11	175,87	14.4.5.15	66,04
2.3.4.12	66,66	14.4.5.16	51,20
9.3.4.5	66,25	5.6.1.2	48,71
9.3.4.11	55,07	16.6.1.2	73,42
9.3.4.12	172,54	15.6.1.2	169,42
10.3.4.5	176,48	15.6.1.17	10,58
10.3.4.11	62,20	16.6.1.17	106,58
10.3.4.12	55,27	5.6.1.17	131,29

cyclohexanone αα' dibromée

isomère trans

bromes en -7 et -16

conformation chaise

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	1,822
Wb	0,240
Wd	0,552
Wdp	8,037
ΣW	10,651
W_L	- 3,016
$\Sigma W+W_L$	7,635

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br_7	1,9
C - Br_{16}	2,2
μ_D	3,67D

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	0,02 kcal

FIGURE : 85

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,286	0,791	0
3	1,270	1,907	1,049
4	0	2,761	0,978
5	- 1,270	1,907	1,049
6	- 1,286	0,791	0
7	2,133	0,134	0,162
8 Br	1,740	1,453	- 1,766
9	1,407	1,486	2,078
10	2,192	2,541	0,985
11	0	3,552	1,771
12	0	3,413	0,067
13	- 1,407	1,486	2,078
14	- 2,192	2,541	0,985
15	- 2,133	0,134	0,162
16 Br	- 1,740	1,453	- 1,767
17	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	116,78
1.2.3	111,89
2.3.4.	112,51
3.4.5	111,99
7.2.1	110,32
8.2.1	112,19
9.3.2	110,71
10.3.2	111,36
11.4.3	111,14
12.4.3	111,21
17.1.2	121,60

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	9,18°
17.1.2.8	100,44°

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 1,041
Wb . .	0,661
Wd . .	3,147
Wdp. .	6,580
ΣW . .	9,346

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	1,9
μ_D	3,90D

cis dibromo-2,6 cyclohexanone

bromes diaxiaux

conformation chaise

10 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$

FIGURE : 86

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,291	0,783	0
3	1,258	1,897	1,051
4	0	2,763	0,923
5	- 1,258	1,897	1,051
6	- 1,291	0,783	0
7	2,105	0,107	0,240
8 Br	1,690	1,487	- 1,763
9	1,282	1,437	2,071
10	2,173	2,536	0,961
11	0	3,546	1,724
12	0	3,297	- 0,061
13	- 1,282	1,437	2,071
14	- 2,173	2,536	0,961
15	- 2,105	0,107	0,240
16 Br	- 1,690	1,487	- 1,763
17	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	117,54
1.2.3	111,01
2.3.4	111,81
3.4.5	110,39
11.4.3	109,60
7.2.1	108,55
9.3.2	109,00
8.2.1	111,34
10.3.2	110,02
12.4.3	110,04
17.1.2	121,23
7.2.8	105,84
9.3.10	106,86
11.4.12	107,12

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	13,48
17.1.2.3	132,72
17.1.2.8	102,63
6.1.2.7	166,52
6.1.2.3	47,28
6.1.2.8	77,37
7.2.3.9	49,91
7.2.3.4	170,48
7.2.3.10	66,96
1.2.3.9	69,33
1.2.3.4	51,25
1.2.3.10	173,81
8.2.3.9	166,02
8.2.3.10	49,16
9.3.4.5	62,89
9.3.4.12	175,47
9.3.4.11	57,92
2.3.4.5	57,68
2.3.4.12	63,96
2.3.4.11	178,50
10.3.4.5	179,78
10.3.4.12	58,60
10.3.4.11	58,94
8.2.3.4	73,41

Energie (kcal/mole)	
Wa	2,540
Wb	0,664
Wd	0,625
Wdp. . . .	6,853
ΣW	10,681
W_L	- 2,717
ΣW + W_L . .	7,964

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	1,9
μ_D	3,74D

cis dibromo-2,6 cyclohexanone

bromes diaxiaux

conformation chaise

10 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 87

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,289	0,786	0
3	1,260	1,917	1,033
4	- 0,002	2,780	0,922
5	- 1,259	1,912	1,038
6	- 1,289	0,786	0
7	2,112	0,117	0,229
8 Br	1,676	1,485	- 1,768
9	1,317	1,475	2,062
10	2,167	2,563	0,904
11	0	3,549	1,738
12	- 0,005	3,316	- 0,062
13	- 1,304	1,468	2,066
14	- 2,169	2,556	0,920
15	- 2,116	0,119	0,220
16 Br	- 1,648	1,510	- 1,764
17	0,001	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	117,24	13.5.6	109,21
1.2.3	111,59	14.5.4	109,48
2.3.4	112,50	14.5.6	109,53
i	42,41	15.6.5	109,26
i'	42,67	15.6.1	109,26
1.6.5	111,47	16.6.5	110,20
7.2.1	109,01	16.6.1	110,64
7.2.3	109,14	17.1.6	121,43
8.2.1	110,97	17.1.2	121,34
8.2.3	110,65	7.2.8	105,26
9.3.2	109,06	9.3.10	106,96
9.3.4	109,32	11.4.12	108,05
10.3.2	109,38	13.5.14	107,00
10.3.4	109,49	15.6.16	105,85
11.4.3	109,49	4.5.6	112,40
11.4.5	109,51	3.4.5	110,58
12.4.3	109,62		
12.4.5	109,55		
13.5.4	109,08		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	46,50	3.4.5.6	56,11
6.1.2.7	167,11	3.4.5.14	178,07
6.1.2.8	77,41	3.4.5.13	65,16
17.1.2.3	133,50	11.4.5.6	176,84
17.1.2.7	12,89	11.4.5.14	61,20
17.1.2.8	102,59	11.4.5.13	55,57
1.2.3.4	50,17	12.4.5.6	64,81
1.2.3.9	71,29	12.4.5.14	57,14
1.2.3.10	172,05	12.4.5.13	173,92
7.2.3.4	170,70	4.5.6.1	50,66
7.2.3.9	49,24	4.5.6.15	171,51
7.2.3.10	67,41	4.5.6.16	72,59
8.2.3.4	73,92	13.4.5.1	70,53
8.2.3.9	164,62	13.4.5.15	50,32
8.2.3.10	47,96	13.4.5.16	166,22
2.3.4.5	55,85	14.4.5.1	172,59
2.3.4.11	176,60	14.4.5.15	66,55
2.3.4.12	65,03	14.4.5.16	49,34
9.3.4.5	65,46	5.6.1.2	46,74
9.3.4.11	55,29	16.6.1.2	76,26
9.3.4.12	173,66	15.6.1.2	167,60
10.3.4.5	177,68	15.6.1.17	12,40
10.3.4.11	61,57	16.6.1.17	103,74
10.3.4.12	56,80	5.6.1.17	133,26

Energie (Kcal/mole)	
Wa	2,729
Wb	0,473
Wd	0,694
Wdp	6,921
ΣW	10,816
W_L	- 2,822
ΣW+W_L . . .	7,994

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	2 10^{-3} kcal

cyclohexanone αα' dibromée

isomère cis

bromes diaxiaux

conformation chaise

27 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	1,9
μ_D	3,73D

FIGURE : 88

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,290	0,785	0
3	1,258	1,901	1,050
4	0	1,827	1,921
5	- 1,258	1,901	1,050
6	- 1,290	0,785	0
7 Br	2,774	- 0,409	0,370
8	1,478	1,200	- 0,985
9	2,170	1,838	1,696
10	1,311	2,899	0,544
11	0	2,674	2,652
12	0	0,873	2,507
13	- 2,170	1,838	1,696
14	- 1,311	2,899	0,544
15 Br	- 2,774	- 0,409	0,370
16	- 1,478	1,200	- 0,985
17	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	117,35
1.2.3	111,14
2.3.4	111,82
3.4.5	110,39
11.4.3	109,57
7.2.1	109,47
9.3.2	109,75
8.2.1	110,29
10.3.2	109,80
12.4.3	109,81
17.1.2	121,32
7.2.8	106,04
9.3.10	105,75
11.4.12	107,61

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	11,68
17.1.2.3	132,73
17.1.2.8	104,63
6.1.2.7	168,32
6.1.2.3	47,27
6.1.2.8	75,37
7.2.3.9	7,33
7.2.3.4	114,70
7.2.3.10	123,17
1.2.3.9	128,38
1.2.3.4	6,35
1.2.3.10	115,78
8.2.3.9	108,98
8.2.3.10	6,86
9.3.4.5	179,60
9.3.4.12	58,37
9.3.4.11	59,64
2.3.4.5	57,56
2.3.4.12	63,67
2.3.4.11	178,34
10.3.4.5	64,58
10.3.4.12	174,20
10.3.4.11	56,20
8.2.3.4	128,99

Energie (kcal/mole)	
Wa	2,236
Wb	0,420
Wd	5,621
Wdp	7,449
ΣW	15,726
W_L	- 2,885
ΣW + W_L . .	12,841

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	10^{-1} kcal

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br	1,7

cyclohexanone αα' dibromée

isomère cis, bromes diéquatoriaux

conformation bateau

10 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 89

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,291	0,784	0
3	1,220	1,966	0,971
4	0,003	1,859	1,896
5	- 1,248	1,930	1,015
6	- 1,291	0,784	0
7 Br	2,769	- 0,373	0,492
8	1,481	1,154	- 1,002
9	2,154	1,992	1,591
10	1,159	2,922	0,387
11	0,029	0,883	2,446
12	0,005	2,715	2,620
13	- 2,160	1,886	1,665
14	- 1,268	2,911	0,472
15 Br	- 2,779	- 0,396	0,396
16	- 1,471	1,183	- 0,993
17	- 0,002	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	117,47	13.5.6	109,38
1.2.3	111,17	14.5.4	109,49
2.3.4	111,44	14.5.6	109,44
i	39,34	15.6.5	109,95
i'	41,51	15.6.1	109,89
1.6.5	111,38	16.6.5	109,59
7.2.1	109,98	16.6.1	109,45
7.2.3	109,56	17.1.6	121,19
8.2.1	109,09	17.1.2	121,35
8.2.3	109,26	7.2.8	107,70
9.3.2	109,25	9.3.10	108,25
9.3.4	109,22	11.4.12	110,40
10.3.2	109,27	13.5.14	107,51
10.3.4	109,34	15.6.16	106,46
11.4.3	109,81	4.5.6	111,68
11.4.5	109,93	3.4.5	107,33
12.4.3	109,59		
12.4.5	109,68		
13.5.4	109,25		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	42,83	3.4.5.6	60,58
6.1.2.7	164,36	3.4.5.14	60,79
6.1.2.8	77,72	3.4.5.13	178,29
17.1.2.3	137,17	11.4.5.6	58,84
17.1.2.7	15,64	11.4.5.14	179,84
17.1.2.8	102,28	11.4.5.13	62,30
1.2.3.4	12,62	12.4.5.6	179,59
1.2.3.9	133,40	12.4.5.14	58,21
1.2.3.10	108,33	12.4.5.13	59,28
7.2.3.4	109,14	4.5.6.1	8,07
7.2.3.9	116,35	4.5.6.15	113,99
7.2.3.10	129,91	4.5.6.16	129,32
8.2.3.4	133,08	13.4.5.1	129,12
8.2.3.9	106,14	13.4.5.15	7,07
8.2.3.10	121,29	13.4.5.16	109,62
2.3.4.5	63,25	14.4.5.1	113,33
2.3.4.11	56,24	14.4.5.15	124,62
2.3.4.12	177,70	14.4.5.16	7,92
9.3.4.5	175,95	5.6.1.2	45,38
9.3.4.11	64,56	16.6.1.2	75,96
9.3.4.12	56,89	15.6.1.2	167,46
10.3.4.5	57,67	15.6.1.17	12,53
10.3.4.11	177,16	16.6.1.17	104,04
10.3.4.12	61,39	5.6.1.17	134,62

Energie (Kcal/mole)	
Wa	2,531
Wb	0,734
Wd	5,473
Wdp	7,349
ΣW	16,087
W_L	- 2,899
ΣW+W_L	13,188

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20'
ΔW	$2\ 10^{-3}$ kcal

cyclohexanone αα' dibromée

isomère cis bromes diéquatoriaux

conformation bateau symétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br_7	1,7
C - Br_{15}	1,7

FIGURE : 90

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,288	0,787	0
3	1,248	1,967	0,977
4	0,012	1,883	1,878
5	- 1,256	1,930	1,020
6	- 1,288	0,787	0
7 Br	2,777	- 0,374	0,447
8	1,478	1,159	- 1,002
9	2,171	1,953	1,613
10	1,223	2,927	0,399
11	0,036	0,928	2,464
12	0,012	2,733	2,610
13	- 2,156	1,859	1,685
14	- 1,308	2,913	0,483
15	- 2,120	0,125	0,216
16 Br	- 1,622	1,499	- 1,774
17	- 0,007	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	117,13	13.5.6	109,31
1.2.3	112,26	14.5.4	109,50
2.3.4	110,78	14.5.6	109,48
i	39,63	15.6.5	109,84
i'	41,74	15.6.1	109,58
1.6.5	111,78	16.6.5	109,79
7.2.1	110,02	16.6.1	109,75
7.2.3	109,52	17.1.6	121,10
8.2.1	109,10	17.1.2	121,77
8.2.3	109,27	7.2.8	106,49
9.3.2	109,31	9.3.10	108,76
9.3.4	109,24	11.4.12	107,73
10.3.2	109,34	13.5.14	107,62
10.3.4	109,39	15.6.16	105,93
11.4.3	109,68	4.5.6	111,58
11.4.5	109,68	3.4.5	109,66
12.4.3	110,04		
12.4.5	110,03		
13.5.4	109,26		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	43,56	3.4.5.6	58,48
6.1.2.7	165,80	3.4.5.14	62,89
6.1.2.8	77,72	3.4.5.13	179,49
17.1.2.3	136,64	11.4.5.6	62,01
17.1.2.7	14,20	11.4.5.14	176,62
17.1.2.8	102,28	11.4.5.13	58,98
1.2.3.4	10,38	12.4.5.6	179,68
1.2.3.9	130,81	12.4.5.14	58,28
1.2.3.10	110,25	12.4.5.13	59,36
7.2.3.4	112,15	4.5.6.1	6,16
7.2.3.9	8,28	4.5.6.15	115,70
7.2.3.10	127,23	4.5.6.16	128,20
8.2.3.4	131,56	13.4.5.1	127,13
8.2.3.9	108,01	13.4.5.15	5,27
8.2.3.10	10,93	13.4.5.16	110,84
2.3.4.5	60,67	14.4.5.1	115,22
2.3.4.11	59,82	14.4.5.15	122,92
2.3.4.12	178,17	14.4.5.16	6,82
9.3.4.5	178,87	5.6.1.2	45,80
9.3.4.11	60,64	16.6.1.2	76,26
9.3.4.12	57,70	15.6.1.2	167,81
10.3.4.5	59,92	15.6.1.17	12,19
10.3.4.11	179,61	16.6.1.17	107,74
10.3.4.12	61,24	5.6.1.17	134,20

cyclohexanone αα' dibromée

isomère trans

conformation bateau symétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	2,604
Wb	0,443
Wd	5,576
Wdp	8,083
ΣW	16,705
W_L	- 3,248
$\Sigma W + W_L$	13,457

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br_7	1,9
C - Br_{16}	2,2

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,01 kcal

FIGURE : 91

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,291	0,783	0
3	1,252	1,969	0,969
4	0	1,900	1,850
5	- 1,252	1,969	0,969
6	- 1,291	0,783	0
7	2,090	0,118	0,311
8 Br	1,782	1,345	- 1,791
9	2,167	1,957	1,615
10	1,262	2,931	0,395
11	0	2,737	2,593
12	0	0,944	2,433
13	- 2,167	1,957	1,615
14	- 1,262	2,931	0,395
15	- 2,090	0,118	0,311
16 Br	- 1,782	1,345	- 1,791
17	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	117,52
1.2.3	112,31
2.3.4	110,45
3.4.5	109,59
11.4.3	110,36
7.2.1	108,19
9.3.2	109,59
8.2.1	111,49
10.3.2	109,91
12.4.3	109,75
17.1.2	121,24
7.2.8	104,78
9.3.10	107,34
11.4.12	106,96

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	17,53
17.1.2.3	136,87
17.1.2.8	97,18
6.1.2.7	162,47
6.1.2.3	43,13
6.1.2.8	82,82
7.2.3.9	11,09
7.2.3.4	109,74
7.2.3.10	128,82
1.2.3.9	130,43
1.2.3.4	9,59
1.2.3.10	111,85
8.2.3.9	103,62
8.2.3.10	14,11
9.3.4.5	177,94
9.3.4.12	61,47
9.3.4.11	56,18
2.3.4.5	61,23
2.3.4.12	59,37
2.3.4.11	177,02
10.3.4.5	60,20
10.3.4.12	179,20
10.3.4.11	61,55
8.2.3.4	135,55

Energie (kcal/mole)	
Wa	2,549
Wb	1,097
Wd	5,442
Wdp. . . .	6,805
ΣW	15,893
W_L	- 2,608
$\Sigma W + W_L$ . .	13,285

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,1 kcal

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	1,9

cyclohexanone αα' dibromée

isomère cis

bromes diaxiaux

conformation bateau

10 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 92

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,295	0,777	0
3	1,233	1,960	0,972
4	- 0,003	1,885	1,874
5	- 1,279	1,913	1,028
6	- 1,295	0,777	0
7	2,114	0,123	0,279
8 Br	1,688	1,415	- 1,790
9	2,156	1,960	1,609
10	1,211	2,917	0,389
11	0,029	0,949	2,491
12	- 0,003	2,753	2,584
13	- 2,171	1,815	1,701
14	- 1,357	2,898	0,499
15	- 2,121	0,106	0,207
16 Br	- 1,665	1,481	- 1,770
17	0,004	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	118,04	13.5.6	109,30
1.2.3	111,29	14.5.4	109,49
2.3.4	111,62	14.5.6	109,53
i	39,39	15.6.5	109,77
i'	42,15	15.6.1	109,54
1.6.5	111,91	16.6.5	110,20
7.2.1	109,72	16.6.1	110,50
7.2.3	109,39	17.1.6	121,18
8.2.1	110,06	17.1.2	120,77
8.2.3	109,87	7.2.8	106,39
9.3.2	109,17	9.3.10	108,15
9.3.4	109,22	11.4.12	107,32
10.3.2	109,28	13.5.14	107,76
10.3.4	109,34	15.6.16	104,68
11.4.3	110,00	4.5.6	111,44
11.4.5	110,03	3.4.5	110,27
12.4.3	109,60		
12.4.5	109,60		
13.5.4	109,25		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	42,92	3.4.5.6	56,82
6.1.2.7	164,13	3.4.5.14	64,51
6.1.2.8	79,13	3.4.5.13	177,70
17.1.2.3	137,08	11.4.5.6	64,68
17.1.2.7	15,87	11.4.5.14	174,00
17.1.2.8	100,88	11.4.5.13	56,20
1.2.3.4	10,95	12.4.5.6	177,55
1.2.3.9	131,79	12.4.5.14	56,22
1.2.3.10	110,11	12.4.5.13	61,58
7.2.3.4	110,44	4.5.6.1	5,06
7.2.3.9	103,93	4.5.6.15	116,78
7.2.3.10	128,49	4.5.6.16	128,44
8.2.3.4	133,11	13.4.5.1	125,91
8.2.3.9	106,05	13.4.5.15	4,06
8.2.3.10	120,46	13.4.5.16	110,71
2.3.4.5	60,39	14.4.5.1	116,24
2.3.4.11	61,12	14.4.5.15	121,92
2.3.4.12	178,89	14.4.5.16	7,14
9.3.4.5	178,81	5.6.1.2	46,33
9.3.4.11	59,68	16.6.1.2	76,88
9.3.4.12	58,08	15.6.1.2	168,31
10.3.4.5	60,64	15.6.1.17	11,69
10.3.4.11	177,85	16.6.1.17	103,12
10.3.4.12	60,09	5.6.1.17	133,67

cyclohexanone αα' dibromée

isomère cis bromes diaxiaux

conformation bateau symétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	3,095
Wb	0,540
Wd	5,577
Wdp	7,935
ΣW	17,146
W_L	- 2,885
$\Sigma W + W_L$ . . .	14,261

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br_8	1,9
C - Br_{16}	1,9

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,01 kcal

FIGURE : 93

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,285	0,793	0
3	1,069	2,149	- 0,680
4	0,003	2,993	0,026
5	- 1,073	2,138	0,703
6	- 1,285	0,793	0
7	1,614	0,949	1,022
8 Br	2,692	- 0,180	- 0,913
9	2,035	2,716	- 0,720
10	0,763	1,976	- 1,745
11	0,490	3,643	0,798
12	- 0,473	3,682	- 0,719
13	- 0,767	1,937	1,763
14	- 2,038	2,706	0,751
15	- 2,051	0,228	0,520
16 Br	1,946	1,058	- 1,804
17	- 0,004	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	116,60	13.5.6	108,33
1.2.3	110,19	14.5.4	109,91
2.3.4	112,38	14.5.6	110,18
i	26,37	15.6.5	109,59
i'	27,31	15.6.1	109,07
1.6.5	110,08	16.6.5	110,75
7.2.1	109,47	16.6.1	111,22
7.2.3	109,55	17.1.6	121,50
8.2.1	110,70	17.1.2	121,90
8.2.3	109,71	7.2.8	107,17
9.3.2	110,00	9.3.10	106,26
9.3.4	109,68	11.4.12	106,60
10.3.2	108,89	13.5.14	106,59
10.3.4	109,43	15.6.16	106,03
11.4.3	109,57	4.5.6	112,60
11.4.5	108,92	3.4.5	112,62
12.4.3	109,15		
12.4.5	109,79		
13.5.4	109,04		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	28,25	3.4.5.6	28,82
6.1.2.7	92,30	3.4.5.14	152,07
6.1.2.8	149,78	3.4.5.13	91,44
17.1.2.3	151,76	11.4.5.6	150,60
17.1.2.7	87,70	11.4.5.14	86,16
17.1.2.8	30,22	11.4.5.13	30,34
1.2.3.4	60,02	12.4.5.6	93,02
1.2.3.9	177,47	12.4.5.14	30,22
1.2.3.10	61,39	12.4.5.13	146,72
7.2.3.4	60,47	4.5.6.1	59,81
7.2.3.9	62,05	4.5.6.15	179,80
7.2.3.10	178,13	4.5.6.16	63,60
8.2.3.4	177,86	13.4.5.1	60,86
8.2.3.9	55,34	13.4.5.15	59,10
8.2.3.10	60,73	13.4.5.16	175,74
2.3.4.5	30,19	14.4.5.1	177,10
2.3.4.11	91,21	14.4.5.15	57,14
2.3.4.12	152,40	14.4.5.16	59,50
9.3.4.5	152,89	5.6.1.2	29,25
9.3.4.11	31,49	16.6.1.2	93,88
9.3.4.12	84,90	15.6.1.2	149,52
10.3.4.5	90,91	15.6.1.17	30,48
10.3.4.11	147,68	16.6.1.17	86,12
10.3.4.12	31,29	5.6.1.17	150,75

cyclohexanone αα' dibromée

isomère cis

conformation croisée

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	2,377
Wb	0,385
Wd	3,587
Wdp	7,986
ΣW	14,336
W_L	- 2,973
$\Sigma W + W_L$ . . .	11,363

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br_8	1,9
C - Br_{16}	2,2

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

FIGURE : 94

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,302	0,764	0
3	1,311	2,164	- 0,622
4	- 0,019	2,981	- 0,308
5	- 1,065	2,160	0,580
6	- 1,302	0,764	0
7 Br	2,002	0,873	1,806
8	2,006	0,165	- 0,569
9	2,151	2,807	- 0,251
10	1,431	2,132	- 1,736
11	0,264	3,928	0,221
12	- 0,530	3,180	- 1,285
13	- 0,668	2,154	1,632
14	- 1,979	2,795	0,586
15	- 1,981	0,255	0,676
16 Br	- 2,117	0,811	- 1,760
17	- 0,020	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	119,20	13.5.6	113,93
1.2.3	117,85	14.5.4	108,16
2.3.4	113,52	14.5.6	112,63
i	23,95	15.6.5	107,03
i'	22,25	15.6.1	107,55
1.6.5	108,77	16.6.5	112,92
7.2.1	109,85	16.6.1	111,99
7.2.3	108,93	17.1.6	119,46
8.2.1	106,26	17.1.2	121,34
8.2.3	106,74	7.2.8	106,58
9.3.2	113,18	9.3.10	105,37
9.3.4	109,37	11.4.12	112,07
10.3.2	112,20	13.5.14	106,46
10.3.4	111,49	15.6.16	108,32
11.4.3	112,51	4.5.6	111,34
11.4.5	113,89	3.4.5	112,90
12.4.3	111,46		
12.4.5	110,31		
13.5.4	111,58		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	27,33	3.4.5.6	50,22
6.1.2.7	98,19	3.4.5.14	171,96
6.1.2.8	146,90	3.4.5.13	75,24
17.1.2.3	152,67	11.4.5.6	171,26
17.1.2.7	81,81	11.4.5.14	67,00
17.1.2.8	33,10	11.4.5.13	45,79
1.2.3.4	38,34	12.4.5.6	67,35
1.2.3.9	157,84	12.4.5.14	54,39
1.2.3.10	83,07	12.4.5.13	167,19
7.2.3.4	87,63	4.5.6.1	61,75
7.2.3.9	31,87	4.5.6.15	177,68
7.2.3.10	150,96	4.5.6.16	63,22
8.2.3.4	157,65	13.4.5.1	60,09
8.2.3.9	82,85	13.4.5.15	55,84
8.2.3.10	36,24	13.4.5.16	174,95
2.3.4.5	0	14.4.5.1	178,53
2.3.4.11	121,76	14.4.5.15	65,54
2.3.4.12	116,93	14.4.5.16	53,56
9.3.4.5	123,88	5.6.1.2	23,57
9.3.4.11	2,12	16.6.1.2	101,94
9.3.4.12	119,19	15.6.1.2	139,16
10.3.4.5	124,06	15.6.1.17	40,84
10.3.4.11	114,18	16.6.1.17	78,06
10.3.4.12	7,13	5.6.1.17	156,43

cyclohexanone αα' dibromée

isomère trans

conformation bateau déformé

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	2,413
Wb	3,783
Wd	5,045
Wdp	7,433
ΣW	18,674
W_L	- 3,171
ΣW+W_L	15,503

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	1,9
C - Br	1,9

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,1 kcal

FIGURE : 95

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,288	0,788	0
3	1,223	2,096	0,796
4	- 0,068	2,916	0,554
5	- 1,023	2,228	- 0,452
6	- 1,288	0,788	0
7 Br	2,760	- 0,292	0,656
8	1,526	1,027	- 1,031
9	1,273	1,858	1,890
10	2,117	2,730	0,562
11	- 0,601	3,062	1,529
12	0,202	3,932	0,164
13	- 1,981	2,809	- 0,503
14	- 0,563	2,236	- 1,474
15	- 1,711	0,787	0,999
16 Br	- 2,592	- 0,036	- 1,177
17	- 0,004	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	117,07	13.5.6	110,69
1.2.3	114,17	14.5.4	110,72
2.3.4	114,24	14.5.6	110,26
i	31,30	15.6.5	109,85
i'	17,15	15.6.1	109,38
1.6.5	110,08	16.6.5	109,65
7.2.1	110,87	16.6.1	110,59
7.2.3	109,38	17.1.6	121,27
8.2.1	107,56	17.1.2	121,66
8.2.3	108,38	7.2.8	106,12
9.3.2	108,95	9.3.10	106,74
9.3.4	108,65	11.4.12	107,38
10.3.2	109,95	13.5.14	107,80
10.3.4	110,52	15.6.16	107,25
11.4.3	110,37	4.5.6	109,43
11.4.5	110,35	3.4.5	112,37
12.4.3	110,63		
12.4.5	110,10		
13.5.4	110,17		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	34,71	3.4.5.6	52,85
6.1.2.7	158,79	3.4.5.14	68,16
6.1.2.8	85,59	3.4.5.13	174,06
17.1.2.3	145,29	11.4.5.6	68,55
17.1.2.7	21,21	11.4.5.14	170,43
17.1.2.8	94,41	11.4.5.13	52,65
1.2.3.4	43,89	12.4.5.6	174,42
1.2.3.9	76,22	12.4.5.14	53,40
1.2.3.10	167,12	12.4.5.13	64,38
7.2.3.4	168,77	4.5.6.1	62,52
7.2.3.9	48,66	4.5.6.15	57,98
7.2.3.10	68,00	4.5.6.16	175,60
8.2.3.4	75,95	13.4.5.1	177,27
8.2.3.9	163,94	13.4.5.15	62,23
8.2.3.10	47,28	13.4.5.16	55,39
2.3.4.5	0	14.4.5.1	58,09
2.3.4.11	121,40	14.4.5.15	178,60
2.3.4.12	121,26	14.4.5.16	63,79
9.3.4.5	120,89	5.6.1.2	18,30
9.3.4.11	0,50	16.6.1.2	139,61
9.3.4.12	117,85	15.6.1.2	102,49
10.3.4.5	123,53	15.6.1.17	77,51
10.3.4.11	115,07	16.6.1.17	40,39
10.3.4.12	2,27	5.6.1.17	161,70

cyclohexanone αα' dibromée

isomère trans

conformation bateau déformé

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	1,763
Wb	0,822
Wd	4,108
Wdp	7,957
ΣW	14,650
W_L	- 2,388
ΣW+W_L	12,262

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	1,9
C - Br	1,9

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

FIGURE : 96

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,291	0,783	0
3	1,218	2,124	- 0,737
4	- 0,077	2,935	- 0,469
5	- 1,042	2,208	0,503
6	- 1,291	0,783	0
7 Br	1,905	1,064	1,819
8	2,055	0,175	- 0,473
9	2,104	2,761	- 0,481
10	1,272	1,941	- 1,841
11	0,191	3,936	- 0,042
12	- 0,604	3,120	- 1,441
13	- 0,607	2,193	1,536
14	- 2,001	2,786	0,555
15 Br	- 2,623	- 0,073	1,121
16	- 1,699	0,808	- 1,005
17	0,005	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	117,56	13.5.6	110,66
1.2.3	114,37	14.5.4	109,91
2.3.4	114,84	14.5.6	110,82
i	28,75	15.6.5	109,43
i'	19,16	15.6.1	111,00
1.6.5	110,07	16.6.5	110,10
7.2.1	110,21	16.6.1	109,48
7.2.3	109,84	17.1.6	121,44
8.2.1	108,16	17.1.2	121,01
8.2.3	108,34	7.2.8	105,51
9.3.2	110,46	9.3.10	106,20
9.3.4	110,14	11.4.12	107,17
10.3.2	109,18	13.5.14	107,24
10.3.4	108,45	15.6.16	106,70
11.4.3	110,72	4.5.6	109,35
11.4.5	110,44	3.4.5	112,50
12.4.3	110,48		
12.4.5	110,45		
13.5.4	111,35		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	31,87	3.4.5.6	52,22
6.1.2.7	92,44	3.4.5.14	173,30
6.1.2.8	152,68	3.4.5.13	69,54
17.1.2.3	148,13	11.4.5.6	173,93
17.1.2.7	87,56	11.4.5.14	64,98
17.1.2.8	27,32	11.4.5.13	52,17
1.2.3.4	42,19	12.4.5.6	69,20
1.2.3.9	165,54	12.4.5.14	51,88
1.2.3.10	78,03	12.4.5.13	169,04
7.2.3.4	82,32	4.5.6.1	62,95
7.2.3.9	41,03	4.5.6.15	174,81
7.2.3.10	157,46	4.5.6.16	57,83
8.2.3.4	162,90	13.4.5.1	58,45
8.2.3.9	73,75	13.4.5.15	63,79
8.2.3.10	42,68	13.4.5.16	179,25
2.3.4.5	0	14.4.5.1	177,29
2.3.4.11	121,56	14.4.5.15	55,05
2.3.4.12	121,40	14.4.5.16	61,93
9.3.4.5	124,20	5.6.1.2	20,46
9.3.4.11	2,64	16.6.1.2	100,69
9.3.4.12	114,40	15.6.1.2	141,76
10.3.4.5	121,29	15.6.1.17	38,24
10.3.4.11	117,14	16.6.1.17	79,31
10.3.4.12	0,13	5.6.1.17	159,54

cyclohexanone αα' dibromée

isomère cis

conformation bateau déformé

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	2,369
Wb	1,056
Wd	4,446
Wdp	8,205
ΣW	16,076
W_L	- 3,036
$\Sigma W+W_L$	13,040

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br_7	2,2
C - Br_{15}	1,9

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

FIGURE : 97

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
2	0	0	0
3	1,254	0,880	0
4	1,181	1,998	1,044
5	- 0,060	1,912	1,938
6	- 1,345	1,893	1,102
1	- 1,236	0,867	0
17	- 2,123	0,766	- 0,839
7Br	0,041	- 1,235	1,496
8	- 0,001	- 0,627	- 0,886
9	2,163	0,248	0,181
10	1,407	1,322	- 1,019
11	2,114	1,988	1,666
12	1,149	2,994	0,531
14	- 0,080	2,799	2,622
13	- 0,009	0,959	2,526
15Br	- 2,876	1,486	2,222
16	- 1,501	2,865	0,647

Angles (d°)			
1.2.3.	109,92	13.5.4	109,00
2.3.4.	112,34	13.5.6	109,17
3.4.5	113,29	14.5.4	108,46
i	42,97	14.5.6	108,29
i'	46,89	15.6.5	110,45
2.1.6	116,67	15.6.1	109,58
17.1.6	120,28	16.6.5	109,82
7.2.1	112,52	16.6.1	108,22
7.2.3	110,37	17.1.2	123,05
8.2.1	109,31	7.2.8	105,17
8.2.3	109,42	9.3.10	104,99
9.3.2	109,87	11.4.12	106,62
9.3.4	109,89	13.5.14	110,67
10.3.4	109,55	15.6.16	108,45
11.4.3	109,40	4.5.6	111,23
11.4.5	110,51	1.6.5	110,26
12.4.3	109,74		
12.4.5	107,06		
10.3.2	109,75		

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	45,45	3.4.5.13	63,38
7.2.3.10	160,41	3.4.5.6	55,60
7.2.3.4	77,21	14.5.6.15	69,16
8.2.3.9	69,82	14.5.6.16	50,41
8.2.3.10	45,14	14.5.6.5	169,58
8.2.3.4	167,52	13.5.6.15	51,41
1.2.3.9	170,14	13.5.6.16	170,98
1.2.3.10	74,91	13.5.6.5	69,85
1.2.3.4	47,47	4.5.6.15	170,49
9.3.4.11	6,43	4.5.6.16	69,94
9.3.4.12	123,08	4.5.6.5	49,23
9.3.4.5	117,33	15.6.1.2	116,46
10.3.4.11	108,53	16.6.1.2	125,45
10.3.4.12	8,11	5.6.1.2	5,32
10.3.4.5	127,70	15.6.1.17	63,54
2.3.4.11	129,08	16.6.1.17	54,55
2.3.4.12	114,27	5.6.1.17	174,68
2.3.4.5	5,31	6.1.2.7	68,65
11.4.5.14	60,80	6.1.2.8	174,90
11.4.5.13	59,78	6.1.2.3	54,78
11.4.5.6	178,77	17.1.2.7	111,35
12.4.5.14	54,94	17.1.2.8	5,10
12.4.5.13	175,52	17.1.2.3	125,22
12.4.5.6	65,50		
3.4.5.14	176,05		

cyclohexanone αα' dibromée

isomère cis

conformation bateau dissymétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa	4,197
Wb	0,951
Wd	4,049
Wdp	9,136
ΣW	18,333
W_L	- 3,796
$\Sigma W+W_L$	14,537

μ(D)	
C = O	3,1
C - Br_7	2,2
C - Br_{15}	2,2

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

FIGURE : 98

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
2	0	0	0
3	1,269	0,859	0
4	1,221	1,959	1,066
5	- 0,051	1,882	1,917
6	- 1,313	1,930	1,050
1	- 1,250	0,847	0
17	- 2,159	0,666	- 0,802
7Br	0	- 1,249	1,485
8	0	- 0,698	- 0,830
9	2,186	0,225	0,114
10	1,466	1,289	- 1,016
11	2,139	1,940	1,708
12	1,338	2,974	0,605
14	- 0,065	2,686	2,697
13	- 0,045	0,972	2,572
15	- 2,208	1,837	1,656
16Br	- 1,538	3,678	0,239

Angles (d°)			
1.2.3.	111,79	13.5.4	111,15
2.3.4.	112,12	13.5.6	111,15
3.4.5	112,12	14.5.4	111,15
i	44,07	14.5.6	111,15
i'	44,05	15.6.5	111,15
2.1.6	115,88	15.6.1	111,15
17.1.6	122,03	16.6.5	111,15
7.2.1	111,15	16.6.1	111,15
7.2.3	111,15	17.1.2	122,09
8.2.1	111,15	7.2.8	99,87
8.2.3	111,15	9.3.10	99,47
9.3.2	111,15	11.4.12	99,47
9.3.4	111,15	13.5.14	100,20
10.3.4	111,15	15.6.16	102,39
11.4.3	111,15	4.5.6	111,55
11.4.5	111,15	1.6.5	109,69
12.4.3	111,15		
12.4.5	111,15		
10.3.2	111,15		

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	49,90	3.4.5.13	68,79
7.2.3.10	158,72	3.4.5.6	55,87
7.2.3.4	76,19	14.5.6.15	57,49
8.2.3.9	61,39	14.5.6.16	55,86
8.2.3.10	48,42	14.5.6.5	179,20
8.2.3.4	173,52	13.5.6.15	53,19
1.2.3.9	173,76	13.5.6.16	166,54
1.2.3.10	76,43	13.5.6.5	70,13
1.2.3.4	48,66	4.5.6.15	177,85
9.3.4.11	3,03	4.5.6.16	68,80
9.3.4.12	112,84	4.5.6.5	54,52
9.3.4.5	122,06	15.6.1.2	124,71
10.3.4.11	106,78	16.6.1.2	121,94
10.3.4.12	3,03	5.6.1.2	1,38
10.3.4.5	128,13	15.6.1.17	55,29
2.3.4.11	128,13	16.6.1.17	58,06
2.3.4.12	122,06	5.6.1.17	178,62
2.3.4.5	3,03	6.1.2.7	74,25
11.4.5.14	54,38	6.1.2.8	175,45
11.4.5.13	56,30	6.1.2.3	50,60
11.4.5.6	179,05	17.1.2.7	105,75
12.4.5.14	55,43	17.1.2.8	4,55
12.4.5.13	166,12	17.1.2.3	129,40
12.4.5.6	69,23		
3.4.5.14	179,49		

cyclohexanone αα' dibromée

isomère trans

conformation bateau dissymétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br_7	2,2
C - Br_{16}	2,2

Energie (kcal/mole)	
Wa	3,822
Wb	3,435
Wd	4,007
Wdp	8,717
ΣW	19,980
W_L	- 4,050
ΣW+W_L	15,930

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20'
ΔW	0,1 kcal

FIGURE : 99

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
2	0	0	0
3	1,249	0,888	0
4	1,247	1,896	1,154
5	- 0,043	1,808	1,976
6	- 1,280	1,929	1,080
1	- 1,231	0,875	0
17	- 2,130	0,741	- 0,821
7	- 0,001	- 0,645	0,872
8Br	0,011	- 1,162	- 1,554
9	2,173	0,255	0,041
10	1,337	1,426	- 0,979
11	2,134	1,734	1,820
12	1,386	2,938	0,766
14	- 0,056	2,608	2,761
13	- 0,095	0,842	2,544
15Br	- 2,897	1,751	2,137
16	- 1,333	2,919	0,640

Angles (d°)			
1.2.3.	109,18	13.5.4	110,16
2.3.4.	112,36	13.5.6	110,09
3.4.5	111,53	14.5.4	111,11
i	48,86	14.5.6	109,08
i'	45,68	15.6.5	110,34
2.1.6	115,53	15.6.1	110,68
17.1.6	122,12	16.6.5	110,40
7.2.1	110,09	16.6.1	110,40
7.2.3	110,21	17.1.2	122,35
8.2.1	110,59	7.2.8	106,73
8.2.3	110,01	9.3.10	103,78
9.3.2	110,19	11.4.12	104,00
9.3.4	110,16	13.5.14	105,02
10.3.4	109,97	15.6.16	105,28
11.4.3	110,60	4.5.6	111,22
11.4.5	109,97	1.6.5	109,67
12.4.3	110,55		
12.4.5	110,25		
10.3.2	110,04		

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	56,72	3.4.5.13	68,58
7.2.3.10	170,57	3.4.5.6	53,14
7.2.3.4	66,52	14.5.6.15	59,62
8.2.3.9	60,70	14.5.6.16	56,35
8.2.3.10	53,15	14.5.6.5	178,21
8.2.3.4	176,06	13.5.6.15	55,11
1.2.3.9	177,77	13.5.6.16	171,08
1.2.3.10	68,38	13.5.6.5	67,06
1.2.3.4	54,52	4.5.6.15	178,00
9.3.4.11	3,68	4.5.6.16	66,03
9.3.4.12	110,96	4.5.6.5	55,83
9.3.4.5	126,21	15.6.1.2	124,17
10.3.4.11	117,47	16.6.1.2	119,66
10.3.4.12	2,83	5.6.1.2	2,20
10.3.4.5	120,00	15.6.1.17	55,83
2.3.4.11	119,58	16.6.1.17	60,34
2.3.4.12	125,78	5.6.1.17	177,80
2.3.4.5	2,94	6.1.2.7	68,66
11.4.5.14	61,55	6.1.2.8	173,64
11.4.5.13	54,40	6.1.2.3	52,46
11.4.5.6	176,12	17.1.2.7	111,34
12.4.5.14	52,37	17.1.2.8	6,36
12.4.5.13	168,32	17.1.2.3	127,54
12.4.5.6	69,96		
3.4.5.14	175,48		

cyclohexanone αα' dibromée

isomère trans

conformation bateau dissymétrique

27 variables

Fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br_8	1,9
C - Br_{15}	2,2

Energie (kcal/mole)	
Wa	2,112
Wb	0,817
Wd	3,762
Wdp	8,226
ΣW	14,913
W_L	- 2,413
ΣW+W_L	12,500

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	$5\ 10^{-3}$ kcal

FIGURE : 100

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
2	0	0	0
3	1,261	0,869	0
4	1,205	2,033	0,996
5	- 0,053	1,962	1,867
6	- 1,316	1,985	1,000
1	- 1,243	0,857	0
17	- 2,152	0,632	- 0,790
7	0	- 0,667	0,856
8 Br	0,005	- 1,199	- 1,525
9	2,168	0,239	0,190
10	1,472	1,252	- 1,033
11	2,125	2,047	1,637
12	1,266	3,017	0,464
14	- 0,075	2,782	2,629
13	- 0,039	1,070	2,545
15	- 2,206	1,893	1,615
16 Br	- 1,535	3,697	0,115

Angles (d°)			
1.2.3.	110,84	13.5.4	111,67
2.3.4.	113,63	13.5.6	110,91
3.4.5	111,38	14.5.4	111,78
i	40,53	14.5.6	111,35
i'	41,52	15.6.5	110,78
2.1.6	117,63	15.6.1	110,58
17.1.6	121,95	16.6.5	111,38
7.2.1	110,41	16.6.1	111,24
7.2.3	110,42	17.1.2	120,42
8.2.1	110,67	7.2.8	103,92
8.2.3	110,39	9.3.10	101,28
9.3.2	110,29	11.4.12	102,46
9.3.4	110,30	13.5.14	99,84
10.3.4	110,28	15.6.16	103,96
11.4.3	110,57	4.5.6	110,80
11.4.5	110,41	1.6.5	108,87
12.4.3	110,89		
12.4.5	110,81		
10.3.2	110,38		

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	50,51	3.4.5.13	66,38
7.2.3.10	158,03	3.4.5.6	58,49
7.2.3.4	77,50	14.5.6.15	57,74
8.2.3.9	67,41	14.5.6.16	57,45
8.2.3.10	43,68	14.5.6.5	179,56
8.2.3.4	168,16	13.5.6.15	52,51
1.2.3.9	169,61	13.5.6.16	167,70
1.2.3.10	79,30	13.5.6.5	69,28
1.2.3.4	45,18	4.5.6.15	177,63
9.3.4.11	4,73	4.5.6.16	67,19
9.3.4.12	117,68	4.5.6.5	55,82
9.3.4.5	118,42	15.6.1.2	124,00
10.3.4.11	106,31	16.6.1.2	121,02
10.3.4.12	6,63	5.6.1.2	2,08
10.3.4.5	130,53	15.6.1.17	56,00
2.3.4.11	129,16	16.6.1.17	58,98
2.3.4.12	117,90	5.6.1.17	177,93
2.3.4.5	6,00	6.1.2.7	74,25
11.4.5.14	54,05	6.1.2.8	171,26
11.4.5.13	56,87	6.1.2.3	48,44
11.4.5.6	178,26	17.1.2.7	105,75
12.4.5.14	58,76	17.1.2.8	8,74
12.4.5.13	169,68	17.1.2.3	131,56
12.4.5.6	65,45		
3.4.5.14	177,31		

cyclohexanone αα' dibromée

isomère cis

conformation bateau dissymétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa	2,050
Wb	2,812
Wd	4,351
Wdp	8,751
ΣW	17,964
W_L	- 2,622
$\Sigma W + W_L$	15,342

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br_8	1,9
C - Br_{16}	2,2

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	10^{-2} kcal

FIGURE : 101

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,271	0,816	0
3	1,291	1,783	1,188
4	0	2,608	1,217
5	- 1,291	1,783	1,188
6	- 1,271	0,816	0
7 Br	2,867	- 0,282	- 0,100
8	1,375	1,358	- 0,934
9	1,567	0,853	2,845
10	2,847	2,907	1,159
11	0	3,350	2,056
12	0	3,322	0,355
13	- 1,567	0,853	2,845
14	- 2,847	2,907	1,159
15 Br	- 2,867	- 0,282	- 0,100
16	- 1,375	1,358	- 0,934
17	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	114,58
1.2.3	110,61
2.3.4	110,08
3.4.5	114,81
7.2.1	112,73
8.2.1	110,53
9.3.2	111,43
10.3.2	111,60
11.4.3	111,77
12.4.3	109,20
17.1.2	122,70

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	3,20
17.1.2.8	111,19
7.2.3.9	55,26
7.2.3.10	56,06
1.2.3.4	52,18
8.2.3.9	165,25
8.2.3.10	53,93
17.1.2.3	124,14
1.2.3.10	176,76

Energie (Kcal/mole)	
Wa . .	10,893
Wb . .	1,261
Wd . .	6,875
Wdp. .	2,869
. .	21,898

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone αα' dibromée

isomère cis, bromes diéquatoriaux

conformation chaise

10 variables

fonctions C--C $16600\ e^{-3,63r} - 325/r^6$

C--H $30000\ e^{-4,17r} - 140/r^6$

H--H $10000\ e^{-4,6r} - 49,2/r^6$

fonctions C--Br, H--Br, C--CO, H--CO et Br--Br du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br	1,7
μ_D	4,53 D

FIGURE 102

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,278	0,804	0
3	1,288	1,751	1,204
4	0	2,581	1,208
5	- 1,288	1,751	1,204
6	- 1,278	0,804	0
7 Br	2,842	- 0,344	- 0,016
8	1,318	1,396	- 0,909
9	1,465	0,765	2,842
10	2,810	2,917	1,100
11	0	3,293	2,073
12	0	3,231	0,297
13	- 1,465	0,765	2,842
14	- 2,810	2,917	1,100
15 Br	- 2,842	- 0,344	- 0,016
16	- 1,318	1,396	- 0,909
17	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	115,63
1.2.3	109,56
2.3.4	109,34
3.4.5	114,46
11.4.3	110,26
7.2.1	111,53
9.3.2	110,69
8.2.1	108,73
10.3.2	109,76
12.4.3	108,19
17.1.2	122,18
7.2.8	106,63
9.3.10	106,57
11.4.12	105,02

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	0,51
17.1.2.3	123,47
17.1.2.8	117,82
6.1.2.7	179,46
6.1.2.3	56,53
6.1.2.8	62,18
7.2.3.9	54,86
7.2.3.4	177,06
7.2.3.10	62,50
1.2.3.9	69,13
1.2.3.4	53,07
1.2.3.10	173,51
8.2.3.9	172,16
8.2.3.10	54,80
9.3.4.5	66,13
9.3.4.12	173,19
9.3.4.11	58,85
2.3.4.5	56,07
2.3.4.12	64,61
2.3.4.11	178,96
10.3.4.5	176,51
10.3.4.12	55,83
10.3.4.11	58,51
8.2.3.4	65,65

Energie (kcal/mole)	
Wa	14,712
Wb	3,116
Wd	0,213
Wdp	7,140
ΣW	25,182
W_L	- 0,209
ΣW + W_L . .	24,973

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	10^{-3} kcal

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone
αα' dibromée

isomère cis, bromes diéquatoriaux

conformation chaise

10 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br	1,7
μ_D	4,61D

FIGURE : 103

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,282	0,798	0
3	1,283	1,888	1,077
4	- 0,003	2,715	0,985
5	- 1,294	1,894	1,070
6	- 1,282	0,798	0
7 Br	2,809	- 0,380	0,214
8	1,404	1,253	- 0,977
9	1,426	1,076	2,810
10	2,810	3,028	0,842
11	- 0,004	3,503	1,781
12	0,001	3,272	0,012
13	- 1,474	1,102	2,810
14	- 2,812	3,041	0,814
15 Br	- 2,801	- 0,387	0,224
16	- 1,400	1,252	- 0,978
17	- 0,014	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	116,20	13.5.6	109,81
1.2.3	112,12	14.5.4	109,79
2.3.4	109,95	14.5.6	109,91
i	44,64	15.6.5	110,48
i'	44,32	15.6.1	110,01
1.6.5	112,63	16.6.5	109,23
7.2.1	110,32	16.6.1	108,27
7.2.3	110,73	17.1.6	121,23
8.2.1	108,48	17.1.2	122,57
8.2.3	109,53	7.2.8	105,40
9.3.2	109,50	9.3.10	107,60
9.3.4	110,15	11.4.12	105,49
10.3.2	109,69	13.5.14	107,04
10.3.4	109,86	15.6.16	105,97
11.4.3	109,72	4.5.6	109,71
11.4.5	109,68	3.4.5	114,52
12.4.3	108,48		
12.4.5	108,54		
13.5.4	110,53		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	49,34	3.4.5.6	55,04
6.1.2.7	173,26	3.4.5.14	175,93
6.1.2.8	71,76	3.4.5.13	66,21
17.1.2.3	130,66	11.4.5.6	178,89
17.1.2.7	6,74	11.4.5.14	60,23
17.1.2.8	108,24	11.4.5.13	57,64
1.2.3.4	50,30	12.4.5.6	66,34
1.2.3.9	70,88	12.4.5.14	54,55
1.2.3.10	171,25	12.4.5.13	172,42
7.2.3.4	173,98	4.5.6.1	49,70
7.2.3.9	52,80	4.5.6.15	173,17
7.2.3.10	65,06	4.5.6.16	70,64
8.2.3.4	70,19	13.4.5.1	71,97
8.2.3.9	168,63	13.4.5.15	51,49
8.2.3.10	50,76	13.4.5.16	167,69
2.3.4.5	55,53	14.4.5.1	170,52
2.3.4.11	179,37	14.4.5.15	66,01
2.3.4.12	65,87	14.4.5.16	50,18
9.3.4.5	65,24	5.6.1.2	49,20
9.3.4.11	58,59	16.6.1.2	71,69
9.3.4.12	173,36	15.6.1.2	172,93
10.3.4.5	176,37	15.6.1.17	7,07
10.3.4.11	59,80	16.6.1.17	108,31
10.3.4.12	54,96	5.6.1.17	130,80

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone
αα' dibromée

isomère cis

bromes diéquatoriaux

conformation chaise

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	15,511
Wb	2,765
Wd	0,511
Wdp	7,349
ΣW	26,135
W_L	- 0,199
ΣW+W_L	25,936

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br_7	1,7
C - Br_{15}	1,7
μ_D	4,71

FIGURE : 104

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,284	0,795	0
3	1,288	1,842	1,119
4	0	2,671	1,077
5	- 1,288	1,842	1,119
6	- 1,284	0,795	0
7	2,142	0,137	0,088
8 Br	1,673	1,568	- 1,736
9	1,546	1,031	2,840
10	2,847	2,959	1,032
11	0	3,479	1,852
12	0	3,313	0,160
13	- 1,546	1,031	2,840
14	- 2,847	2,959	1,032
15	- 2,142	0,137	0,088
16 Br	- 1,673	1,568	- 1,736
17	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	116,45
1.2.3	111,22
2.3.4	110,33
3.4.5	114,39
11.4.3	110,69
7.2.1	112,37
9.3.2	111,48
8.2.1	111,50
10.3.2	111,81
12.4.3	109,44
17.1.2	121,77
7.2.8	
9.3.10	
11.4.12	

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	4,94
17.1.2.3	128,41
17.1.2.8	104,59
6.1.2.7	
6.1.2.3	
6.1.2.8	
7.2.3.9	49,59
7.2.3.4	
7.2.3.10	48,06
1.2.3.9	
1.2.3.4	56,15
1.2.3.10	73,98
8.2.3.9	54,33
8.2.3.10	
9.3.4.5	
9.3.4.12	
9.3.4.11	
2.3.4.5	
2.3.4.12	
2.3.4.11	
10.3.4.5	
10.3.4.12	
10.3.4.11	
8.2.3.4	

Energie (kcal/mole)	
Wa	13,610
Wb	1,028
Wd	6,527
Wdp. . . .	2,972
ΣW	24,137
W_L	
ΣW + W_L . .	

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	1,9
μ_D	3,82D

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone
αα' dibromée

isomère cis, bromes diaxiaux

conformation chaise

10 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$

fonctions C---Br, H---Br, C---CO, H---CO et Br---Br du tableau 8

FIGURE : 105

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,290	0,785	0
3	1,284	1,834	1,116
4	0	2,666	1,042
5	- 1,284	1,834	1,116
6	- 1,290	0,785	0
7	2,121	0,105	0,154
8 Br	1,628	1,593	- 1,731
9	1,433	0,985	2,832
10	2,820	2,975	0,957
11	0	3,451	1,841
12	0	3,248	0,085
13	- 1,433	0,985	2,832
14	- 2,820	2,975	0,957
15	- 2,121	0,105	0,154
16 Br	- 1,628	1,593	- 1,731
17	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	117,38
1.2.3	110,64
2.3.4	109,87
3.4.5	113,90
11.4.3	110,25
7.2.1	109,20
9.3.2	110,38
8.2.1	111,43
10.3.2	110,09
12.4.3	108,88
17.1.2	121,31
7.2.8	104,73
9.3.10	105,95
11.4.12	104,21

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	8,64
17.1.2.3	128,86
17.1.2.8	106,57
6.1.2.7	171,36
6.1.2.3	51,14
6.1.2.8	73,43
7.2.3.9	49,27
7.2.3.4	171,24
7.2.3.10	67,35
1.2.3.9	70,95
1.2.3.4	51,02
1.2.3.10	172,43
8.2.3.9	164,48
8.2.3.10	47,86
9.3.4.5	65,18
9.3.4.12	173,11
9.3.4.11	59,36
2.3.4.5	56,78
2.3.4.12	64,93
2.3.4.11	178,69
10.3.4.5	178,19
10.3.4.12	56,49
10.3.4.11	57,27
8.2.3.4	73,56

Energie (kcal/mole)	
Wa	17,615
Wb	3,448
Wd	0,612
Wdp. . . .	6,892
ΣW	28,567
W_L	- 1,375
ΣW + W_L . .	27,192

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	1,9
μ_D	3,78D

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	10^{-2} kcal

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone
αα' dibromée

isomère cis, bromes diaxiaux

conformation chaise

10 variables

FIGURE : 106

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,283	0,797	0
3	1,286	1,910	- 1,052
4	- 0,003	2,738	- 0,999
5	- 1,269	1,879	- 1,084
6	- 1,283	0,797	0
7 Br	1,615	1,536	1,763
8	2,132	0,139	- 0,149
9	2,809	3,052	- 0,801
10	1,518	1,164	- 2,806
11	- 0,022	3,348	- 0,059
12	0,005	3,498	- 1,823
13	- 2,820	2,996	- 0,902
14	- 1,379	1,060	- 2,818
15 Br	- 1,552	1,611	1,740
16	- 2,127	0,133	- 0,155
17	- 0,024	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	116,29	13.5.6	109,65
1.2.3	112,66	14.5.4	109,69
2.3.4	111,53	14.5.6	109,71
i	43,38	15.6.5	109,86
i'	45,06	15.6.1	109,85
1.6.5	111,41	16.6.5	109,77
7.2.1	110,27	16.6.1	109,76
7.2.3	110,30	17.1.6	120,73
8.2.1	110,17	17.1.2	122,98
8.2.3	110,20	7.2.8	102,81
9.3.2	110,09	9.3.10	104,75
9.3.4	109,99	11.4.12	104,27
10.3.2	110,19	13.5.14	106,69
10.3.4	110,14	15.6.16	106,06
11.4.3	109,76	4.5.6	111,35
11.4.5	109,72	3.4.5	112,96
12.4.3	109,59		
12.4.5	110,17		
13.5.4	109,64		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	48,10	3.4.5.6	55,06
6.1.2.7	75,60	3.4.5.14	66,58
6.1.2.8	171,60	3.4.5.13	176,57
17.1.2.3	131,90	11.4.5.6	67,77
17.1.2.7	104,40	11.4.5.14	170,60
17.1.2.8	8,40	11.4.5.13	53,75
1.2.3.4	48,34	12.4.5.6	177,99
1.2.3.9	170,69	12.4.5.14	56,35
1.2.3.10	74,26	12.4.5.13	60,50
7.2.3.4	75,34	4.5.6.1	51,58
7.2.3.9	47,01	4.5.6.15	70,38
7.2.3.10	162,06	4.5.6.16	173,37
8.2.3.4	171,83	13.4.5.1	173,10
8.2.3.9	65,82	13.4.5.15	51,14
8.2.3.10	49,23	13.4.5.16	65,12
2.3.4.5	53,13	14.4.5.1	70,04
2.3.4.11	69,67	14.4.5.15	168,00
2.3.4.12	176,39	14.4.5.16	51,74
9.3.4.5	175,56	5.6.1.2	49,49
9.3.4.11	52,76	16.6.1.2	171,29
9.3.4.12	61,19	15.6.1.2	72,47
10.3.4.5	69,51	15.6.1.17	107,53
10.3.4.11	167,69	16.6.1.17	8,71
10.3.4.12	53,74	5.6.1.17	130,51

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone
αα' dibromée

isomère cis

brômes diaxiaux

27 variables

conformation chaise

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	18,262
Wb	3,590
Wd	0,722
Wdp	6,743
ΣW	29,318
W_L	- 1,291
$\Sigma W + W_L$ . . .	28,027

μ (D)	
C=O	3,1
C-Br	1,9
C-Br	1,9
μ_D	3,86

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2'
ΔW	0,1 kcal

FIGURE : 107

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,283	0,797	0
3	1,306	1,874	1,089
4	0,016	2,695	0,990
5	- 1,284	1,889	1,074
6	- 1,283	0,797	0
7 Br	2,814	- 0,383	0,169
8	1,404	1,260	- 0,974
9	1,427	1,036	2,813
10	2,836	3,012	0,868
11	0,018	3,495	1,775
12	0,025	3,259	0,021
13	- 1,473	1,092	2,811
14	- 2,793	3,052	0,834
15	- 2,122	0,125	0,152
16 Br	- 1,531	1,620	- 1,739
17	- 0,016	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	116,33	13.5.6	109,77
1.2.3	112,56	14.5.4	109,98
2.3.4	108,54	14.5.6	110,16
i	45,32	15.6.5	110,02
i'	44,51	15.6.1	109,27
1.6.5	112,13	16.6.5	109,00
7.2.1	110,47	16.6.1	109,43
7.2.3	110,72	17.1.6	121,08
8.2.1	108,66	17.1.2	122,59
8.2.3	109,63	7.2.8	104,47
9.3.2	109,41	9.3.10	108,18
9.3.4	110,20	11.4.12	104,28
10.3.2	110,31	13.5.14	106,67
10.3.4	110,18	15.6.16	106,82
11.4.3	109,64	4.5.6	109,63
11.4.5	109,73	3.4.5	115,39
12.4.3	108,63		
12.4.5	108,57		
13.5.4	110,59		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	50,35	3.4.5.6	55,55
6.1.2.7	174,67	3.4.5.14	176,82
6.1.2.8	71,27	3.4.5.13	65,62
17.1.2.3	129,65	11.4.5.6	180,00
17.1.2.7	5,33	11.4.5.14	58,74
17.1.2.8	108,73	11.4.5.13	58,82
1.2.3.4	50,73	12.4.5.6	66,62
1.2.3.9	69,57	12.4.5.14	54,65
1.2.3.10	171,54	12.4.5.13	172,21
7.2.3.4	174,92	4.5.6.1	49,20
7.2.3.9	54,62	4.5.6.15	171,05
7.2.3.10	64,27	4.5.6.16	72,13
8.2.3.4	70,34	13.4.5.1	72,47
8.2.3.9	169,37	13.4.5.15	49,38
8.2.3.10	50,47	13.4.5.16	166,20
2.3.4.5	55,93	14.4.5.1	170,36
2.3.4.11	179,60	14.4.5.15	67,79
2.3.4.12	66,21	14.4.5.16	49,03
9.3.4.5	63,87	5.6.1.2	49,18
9.3.4.11	60,62	16.6.1.2	71,90
9.3.4.12	173,99	15.6.1.2	171,45
10.3.4.5	176,82	15.6.1.17	8,550
10.3.4.11	58,69	16.6.1.17	108,10
10.3.4.12	54,68	5.6.1.17	130,82

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone
αα' dibromée

isomère trans

27 variables

conformation chaise

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	16,345
Wb	3,013
Wd	0,526
Wdp	8,043
ΣW	27,927
W_L	- 1,311
$\Sigma W + W_L$ . . .	26,616

μ(D)	
C = O	2,8
C- B_{r7}	1,9
C- B_{r16}	2,2
μ_D	3,72

$\Delta\theta_{2.1.6}$	4'
ΔW	10^{-2} kcal

FIGURE : 108

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,271	0,816	0
3	1,284	1,754	1,211
4	0	1,501	2,007
5	- 1,284	1,754	1,211
6	- 1,271	0,816	0
7 Br_{eq}	2,852	- 0,306	- 0,066
8	1,345	1,390	- 0,917
9	2,838	1,452	2,298
10	1,446	3,593	0,685
11	0	2,114	2,944
12	0	0,446	2,384
13	- 2,838	1,452	2,298
14	- 1,446	3,593	0,685
15 Br_{eq}	- 2,852	- 0,306	- 0,066
16	- 1,345	1,390	- 0,917
17	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	114,62
1.2.3	109,76
2.3.4	107,60
3.4.5	113,92
11.4.3	110,15
7.2.1	111,94
9.3.2	111,00
8.2.1	110,08
10.3.2	111,77
12.4.3	109,28
17.1.2	122,69
7.2.8	102,85
9.3.10	103,74
11.4.12	103,54

Dièdres (d°)	
17.1.2.7	2,08
17.1.2.3	122,86
17.1.2.8	115,82
6.1.2.7	177,91
6.1.2.3	57,14
6.1.2.8	64,18
7.2.3.9	2,216
7.2.3.4	123,85
7.2.3.10	113,07
1.2.3.9	122,73
1.2.3.4	1,10
1.2.3.10	121,98
8.2.3.9	115,95
8.2.3.10	0,66
9.3.4.5	178,67
9.3.4.12	58,78
9.3.4.11	54,33
2.3.4.5	59,69
2.3.4.12	62,85
2.3.4.11	175,96
10.3.4.5	63,39
10.3.4.12	174,07
10.3.4.11	60,96
8.2.3.4	122,42

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone
αα' dibromée

isomère cis, bromes diéquatoriaux

conformation bateau

10 variables

fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa	22,170
Wb	5,849
Wd	5,642
Wdp. . . .	7,055
ΣW	40,686
W_L	- 0,382
ΣW + W_L . .	40,304

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,2 kcal

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br	1,7

FIGURE : 110

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,279	0,802	0
3	1,306	1,898	1,071
4	0,023	1,881	1,907
5	-1,275	1,876	1,093
6	-1,279	0,802	0
7 Br	2,810	-0,373	0,200
8	1,451	1,233	-0,981
9	2,836	1,681	2,211
10	1,542	3,620	0,254
11	0,036	0,892	2,601
12	0,028	2,830	2,622
13	-2,772	1,610	2,266
14	-1,551	3,605	0,304
15 Br	-2,798	-0,380	0,242
16	-1,421	1,267	-0,970
17	-0,029	-1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	115,80	13.5.6	109,67
1.2.3	113,26	14.5.4	109,70
2.3.4	111,04	14.5.6	109,72
i	44,33	15.6.5	109,89
i'	45,50	15.6.1	109,85
1.6.5	111,72	16.6.5	109,78
7.2.1	110,27	16.6.1	109,76
7.2.3	110,32	17.1.6	120,74
8.2.1	110,17	17.1.2	123,46
8.2.3	110,19	7.2.8	102,07
9.3.2	110,38	9.3.10	104,84
9.3.4	109,99	11.4.12	107,94
10.3.2	110,27	13.5.14	105,29
10.3.4	110,14	15.6.16	105,67
11.4.3	109,72	4.5.6	112,57
11.4.5	109,63	3.4.5	114,81
12.4.3	109,60		
12.4.5	110,24		
13.5.4	109,64		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	49,52	3.4.5.6	49,84
6.1.2.7	173,68	3.4.5.14	72,64
6.1.2.8	74,41	3.4.5.13	172,19
17.1.2.3	130,48	11.4.5.6	71,12
17.1.2.7	6,31	11.4.5.14	166,40
17.1.2.8	105,59	11.4.5.13	51,24
1.2.3.4	1,39	12.4.5.6	171,74
1.2.3.9	123,66	12.4.5.14	49,27
1.2.3.10	120,97	12.4.5.13	65,90
7.2.3.4	122,74	4.5.6.1	0,44
7.2.3.9	0,47	4.5.6.15	122,66
7.2.3.10	114,88	4.5.6.16	121,54
8.2.3.4	125,31	13.4.5.1	121,88
8.2.3.9	112,43	13.4.5.15	0,28
8.2.3.10	2,93	13.4.5.16	116,12
2.3.4.5	50,46	14.4.5.1	122,93
2.3.4.11	70,46	14.4.5.15	114,88
2.3.4.12	172,68	14.4.5.16	0,92
9.3.4.5	172,94	5.6.1.2	50,16
9.3.4.11	52,03	16.6.1.2	71,85
9.3.4.12	64,84	15.6.1.2	172,37
10.3.4.5	71,99	15.6.1.17	7,62
10.3.4.11	167,10	16.6.1.17	108,15
10.3.4.12	50,23	5.6.1.17	129,84

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone

αα'- dibromée (Br dieq)

isomère cis

27 variables

conformation bateau symétrique

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	25,272
Wb	4,143
Wd	6,024
Wdp	7,355
ΣW	42,794
W_L	-0,347
ΣW+W_L	42,447

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20'
ΔW	0,2 kcal

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br_7	1,7
C - Br_{15}	1,7

FIGURE : 111

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,283	0,790	0
3	1,286	1,910	1,052
4	0,020	1,873	1,913
5	-1,268	1,880	1,083
6	-1,283	0,797	0
7Br	2,804	-0,379	0,258
8	1,465	1,212	-0,986
9	2,842	1,759	2,L68
10	1,459	3,624	0,205
11	0,038	0,963	2,575
12	0,024	2,742	2,627
13	-2,783	1,656	2,241
14	-1,509	3,606	0,277
15	-2,128	0,134	0,153
16 Br	-1,548	1,612	-1,740
17	-0,024	-1,225	0

tétraméthyl-3, 3,5,5 cyclohexanone

$\alpha\alpha'$-dibromée

isomère trans

conformation bateau symétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	116,30	13.5.6	109,65
1.2.3	112,68	14.5.4	109,69
2.3.4	111,49,	14.5.6	109,72
i	43,38	15.6.5	109,86
i'	45,00	15.6.1	109,85
1.6.5	111,40	16.6.5	109,78
7.2.1	110,27	16.6.1	109,76
7.2.3	110,31	17.1.6	120,73
8.2.1	110,17	17.1.2	122,97
8.2.3	110,19	7.2.8	102,78
9.3.2	110,11	9.3.10	104,71
9.3.4	109,99	11.4.12	104,57
10.3.2	110,24	13.5.14	105,01
10.3.4	110,14	15.6.16	106,05
11.4.3	109,74	4.5.6	112,83
11.4.5	109,72	3.4.5	112,98
12.4.3	109,60		
12.4.5	110,16		
13.5.4	109,64		

Energie (Kcal/mole)	
Wa	26,454
Wb	4,077
Wd	5,910
Wdp	8,029
ΣW	44,470
W_L	-0,647
$\Sigma W+W_L$	43,822

$\Delta\theta_{2.1.6}$	1°
ΔW	0,2 kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	48,11	3.4.5.6	51,88
6.1.2.7	171,84	3.4.5.14	70,77
6.1.2.8	75,39	3.4.5.13	174,40
17.1.2.3	131,89	11.4.5.6	70,76
17.1.2.7	8,16	11.4.5.14	166,58
17.1.2.8	104,61	11.4.5.13	51,75
1.2.3.4	0,05	12.4.5.6	174,71
1.2.3.9	126,38	12.4.5.14	52,06
1.2.3.10	118,58	12.4.5.13	62,77
7.2.3.4	119,66	4.5.6.1	1,14
7.2.3.9	2,66	4.5.6.15	120,81
7.2.3.10	117,71	4.5.6.16	122,94
8.2.3.4	127,55	13.4.5.1	123,66
8.2.3.9	110,12	13.4.5.15	1,70
8.2.3.10	4,92	13.4.5.16	114,54
2.3.4.5	53,13	14.4.5.1	121,50
2.3.4.11	69,50	14.4.5.15	116,55
2.3.4.12	176,27	14.4.5.16	0,29
9.3.4.5	175,55	5.6.1.2	49,42
9.3.4.11	52,92	16.6.1.2	72,39
9.3.4.12	61,31	15.6.1.2	171,38
10.3.4.5	69,56	15.6.1.17	8,62
10.3.4.11	167,81	16.6.1.17	107,61
10.3.4.12	53,58	5.6.1.17	130,06

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br_7	1,9
C - Br_{16}	2,2

FIGURE : 112

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,290	0,785	0
3	1,283	1,894	+ 1,057
4	0,033	1,813	- 1,057
5	- 1,227	1,879	- 1,070
6	- 1,290	0,785	0
7 Br	1,583	1,569	1,750
8	2,115	0,108	-0,198
9	1,320	3,597	-0,172
10	2,849	1,724	-2,156
11	0,042	0,852	-2,516
12	0,032	2,667	-2,665
13	- 1,326	3,600	-0,224
14	- 2,785	1,779	-2,188
15 Br	- 1,554	1,594	1,743
16	- 2,116	0,116	-0,219
17	- 0,003	- 1,225	0

tétraméthyl-3,3,5,5, cyclohexanone

$\alpha\alpha'$-dibromée (Br diax)

isomère cis

conformation bateau symétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	117,38	13.5.6	109,30
1.2.3	111,87	14.5.4	109,57
2.3.4	111,27	14.5.6	109,62
i	43,63	15.6.5	109,60
i'	44,31	15.6.1	109,45
1.6.5	109,63	16.6.5	109,33
7.2.1	109,80	16.6.1	109,28
7.2.3	109,30	17.1.6	121,19
8.2.1	109,01	17.1.2	121,44
8.2.3	109,17	7.2.8	107,59
9.3.2	108,90	9.3.10	109,07
9.3.4	109,13	11.4.12	108,65
10.3.2	109,10	13.5.14	105,14
10.3.4	109,34	15.6.16	109,55
11.4.3	109,55	4.5.6	113,55
11.4.5	109,58	3.4.5	110,02
12.4.3	109,50		
12.4.5	109,50		
13.5.4	109,33		

Energie (Kcal/mole)	
Wa	31,102
Wb	3,143
Wd	5,627
Wdp	6,832
ΣW	46,705
W_L	-0,244
$\Sigma W+W_L$	46,461

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2'
ΔW	0,01 kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	48,03	3.4.5.6	57,11
6.1.2.7	73,52	3.4.5.14	179,86
6.1.2.8	168,86	3.4.5.13	65,22
17.1.2.3	131,97	11.4.5.6	63,40
17.1.2.7	106,48	11.4.5.14	59,53
17.1.2.8	11,15	11.4.5.13	174,26
1.2.3.4	6,35	12.4.5.6	177,52
1.2.3.9	113,98	12.4.5.14	59,56
1.2.3.10	127,08	12.4.5.13	55,18
7.2.3.4	128,18	4.5.6.1	5,68
7.2.3.9	7,85	4.5.6.15	125,83
7.2.3.10	111,09	4.5.6.16	114,09
8.2.3.4	114,38	13.4.5.1	116,68
8.2.3.9	125,29	13.4.5.15	3,47
8.2.3.10	6,34	13.4.5.16	123,55
2.3.4.5	56,69	14.4.5.1	128,58
2.3.4.11	63,84	14.4.5.15	111,27
2.3.4.12	177,09	14.4.5.16	8,81
9.3.4.5	63,50	5.6.1.2	47,87
9.3.4.11	175,96	16.6.1.2	167,67
9.3.4.12	56,90	15.6.1.2	72,37
10.3.4.5	177,27	15.6.1.17	107,63
10.3.4.11	56,74	16.6.1.17	12,33
10.3.4.12	62,33	5.6.1.17	132,13

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br_7	1,9
C - Br_{15}	1,9

FIGURE : 113

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,294	0,777	0
3	1,093	2,173	-0,598
4	-0,003	2,950	0,139
5	-1,162	2,128	0,712
6	-1,294	0,777	0
7 Br	2,064	0,866	1,779
8	2,018	0,226	-0,592
9	2,754	3,135	-0,557
10	0,671	2,011	-2,464
11	0,459	3,551	0,965
12	-0,393	3,749	-0,542
13	-0,920	1,805	2,589
14	-2,820	3,085	0,571
15 Br	-2,709	-0,282	0,801
16	-1,601	0,933	-1,029
17	0,007	-1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	118,02	13.5.6	108,48
1.2.3	110,87	14.5.4	110,99
2.3.4	111,58	14.5.6	109,32
i	22,99	15.6.5	110,65
i'	27,69	15.6.1	110,10
1.6.5	112,31	16.6.5	109,81
7.2.1	111,31	16.6.1	108,42
7.2.3	111,63	17.1.6	121,30
8.2.1	108,06	17.1.2	120,67
8.2.3	109,72	7.2.8	105,02
9.3.2	109,51	9.3.10	104,68
9.3.4	110,79	11.4.12	102,01
10.3.2	109,34	13.5.14	105,34
10.3.4	110,72	15.6.16	105,30
11.4.3	109,41	4.5.6	111,38
11.4.5	108,92	3.4.5	116,69
12.4.3	108,52		
12.4.5	110,29		
13.5.4	111,11		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	24,70	3.4.5.6	21,85
6.1.2.7	100,20	3.4.5.14	143,91
6.1.2.8	144,98	3.4.5.13	99,22
17.1.2.3	155,30	11.4.5.6	146,29
17.1.2.7	79,80	11.4.5.14	91,65
17.1.2.8	35,02	11.4.5.13	25,22
1.2.3.4	56,21	12.4.5.6	102,54
1.2.3.9	179,23	12.4.5.14	19,52
1.2.3.10	66,62	12.4.5.13	136,39
7.2.3.4	68,51	4.5.6.1	53,64
7.2.3.9	54,51	4.5.6.15	177,11
7.2.3.10	168,67	4.5.6.16	67,08
8.2.3.4	175,49	13.4.5.1	68,96
8.2.3.9	61,49	13.4.5.15	54,51
8.2.3.10	52,67	13.4.5.16	170;33
2.3.4.5	32,53	14.4.5.1	176,66
2.3.4.11	91,66	14.4.5.15	59,87
2.3.4.12	157,82	14.4.5.16	55,95
9.3.4.5	154,82	5.6.1.2	30,15
9.3.4.11	30,63	16.6.1.2	91,36
9.3.4.12	79,89	15.6.1.2	153,93
10.3.4.5	89,50	15.6.1.17	26,07
10.3.4.11	146,31	16.6.1.17	88,64
10.3.4.12	35,79	5.6.1.17	149,85

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone
αα'-dibromée
isomère cis
conformation croisée
27 variables
fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	18,979
Wb	4,831
Wd	4,155
Wdp	8,479
ΣW	36,445
W_L	-0,503
$\Sigma W+W_L$	35,941

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2'
ΔW	0,01 kcal

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br_7	2,2
C - Br_{15}	1,9
μ	4,70

FIGURE : 114

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,297	0,773	0
3	1,284	2,123	0,724
4	- 0,068	2,932	0,465
5	- 1,144	2,221	- 0,475
6	- 1,297	0,773	0
7 Br	2,735	- 0,349	0,662
8	1,558	0,917	- 1,043
9	1,490	1,837	2,611
10	2,773	3,189	0,150
11	- 0,574	3,125	1,447
12	0,159	3,937	0,024
13	- 2,810	3,166	- 0,336
14	- 0,599	2,316	- 2,314
15	- 2,076	0,709	1,776
16	- 1,996	0,240	- 0,636
17	- 0,003	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	118,43	13.5.6	110,87
1.2.3	116,32	14.5.4	113,54
2.3.4	113,16	14.5.6	111,83
i	28,20	15.6.5	110,80
i'	18,07	15.6.1	109,14
1.6.5	113,47	16.6.5	110,28
7.2.1	109,91	16.6.1	107,57
7.2.3	110,78	17.1.6	120,63
8.2.1	105,92	17.1.2	120,94
8.2.3	109,84	7.2.8	103,14
9.3.2	109,41	9.3.10	107,06
9.3.4	111,97	11.4.12	106,32
10.3.2	109,94	13.5.14	106,97
10.3.4	112,02	15.6.16	105,20
11.4.3	113,54	4.5.6	107,78
11.4.5	111,02	3.4.5	116,17
12.4.3	114,86		
12.4.5	112,05		
13.5.4	111,78		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	31,82	3.4.5.6	47,28
6.1.2.7	158,71	3.4.5.14	75,19
6.1.2.8	90,51	3.4.5.13	167,60
17.1.2.3	148,18	11.4.5.6	74,62
17.1.2.7	21,29	11.4.5.14	162,91
17.1.2.8	89,49	11.4.5.13	45,70
1.2.3.4	40,06	12.4.5.6	171,55
1.2.3.9	81,07	12.4.5.14	49,07
1.2.3.10	161,62	12.4.5.13	68,13
7.2.3.4	166,51	4.5.6.1	57,20
7.2.3.9	45,38	4.5.6.15	65,99
7.2.3.10	71,92	4.5.6.16	177,95
8.2.3.4	80,20	13.4.5.1	176,25
8.2.3.9	158,67	13.4.5.15	53,06
8.2.3.10	41,37	13.4.5.16	63,00
2.3.4.5	0	14.4.5.1	64,46
2.3.4.11	120,65	14.4.5.15	172,35
2.3.4.12	122,91	14.4.5.16	56,28
9.3.4.5	121,35	5.6.1.2	19,77
9.3.4.11	0,69	16.6.1.2	142,03
9.3.4.12	115,74	15.6.1.2	104,33
10.3.4.5	122,06	15.6.1.17	75,67
10.3.4.11	117,29	16.6.1.17	37,97
10.3.4.12	0,85	5.6.1.17	160,23

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone αα' dibromée
isomère cis
27 variables
conformation bateau déformé
fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	17,788
Wb	4,777
Wd	4,619
Wdp	8,718
ΣW	35,902
W_L	- 0,869
$\Sigma W+W_L$	35,033

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br_7	1,9
C - Br_{15}	2,2
μ_D	4,81D

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	10^{-3} kcal

FIGURE : 115

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,300	0,769	0
3	1,263	2,162	0,635
4	- 0,090	2,943	0,296
5	- 1,140	2,161	- 0,620
6	- 1,300	0,769	0
7 Br	2,707	- 0,316	0,779
8	1,610	0,854	- 1,036
9	1,393	1,974	2,542
10	2,781	3,200	0,083
11	- 0,617	3,202	1,250
12	0,145	3,911	- 0,217
13	- 2,805	3,118	- 0,594
14	- 0,552	2,100	- 2,446
15	- 1,649	0,852	1,024
16 Br	- 2,653	- 0,247	- 0,949
17	- 0,003	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	118,80	13.5.6	110,95
1.2.3	116,26	14.5.4	114,19
2.3.4	113,11	14.5.6	112,84
i	24,51	15.6.5	110,21
i'	23,86	15.6.1	108,42
1.6.5	111,90	16.6.5	110,52
7.2.1	109,88	16.6.1	109,49
7.2.3	111,04	17.1.6	120,44
8.2.1	106,65	17.1.2	120,75
8.2.3	109,36	7.2.8	102,68
9.3.2	108,74	9.3.10	106,57
9.3.4	111,38	11.4.12	106,76
10.3.2	110,70	13.5.14	107,08
10.3.4	113,22	15.6.16	106,11
11.4.3	113,91	4.5.6	106,33
11.4.5	111,36	3.4.5	116,06
12.4.3	114,63		
12.4.5	111,82		
13.5.4	111,56		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	27,55	3.4.5.6	49,09
6.1.2.7	154,72	3.4.5.14	74,06
6.1.2.8	94,68	3.4.5.13	168,48
17.1.2.3	152,45	11.4.5.6	73,22
17.1.2.7	25,28	11.4.5.14	163,68
17.1.2.8	85,32	11.4.5.13	46,22
1.2.3.4	38,91	12.4.5.6	172,51
1.2.3.9	80,93	12.4.5.14	49,41
1.2.3.10	162,31	12.4.5.13	68,05
7.2.3.4	165,51	4.5.6.1	61,72
7.2.3.9	45,66	4.5.6.15	59,01
7.2.3.10	71,09	4.5.6.16	175,98
8.2.3.4	81,88	13.4.5.1	179,59
8.2.3.9	158,28	13.4.5.15	58,87
8.2.3.10	41,52	13.4.5.16	58,10
2.3.4.5	0	14.4.5.1	60,24
2.3.4.11	121,00	14.4.5.15	179,04
2.3.4.12	122,10	14.4.5.16	62,06
9.3.4.5	120,04	5.6.1.2	25,84
9.3.4.11	0,95	16.6.1.2	148,73
9.3.4.12	117,86	15.6.1.2	95,92
10.3.4.5	123,73	15.6.1.17	84,08
10.3.4.11	115,28	16.6.1.17	31,27
10.3.4.12	1,63	5.6.1.17	154,16

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone αα' dibromée

isomère trans, bromes diéquatoriaux

27 variables

conformation bateau déformé

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	16,746
Wb	5,187
Wd	4,509
Wdp	8,233
ΣW	34,676
W_L	- 0,214
$\Sigma W+W_L$	34,462

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br_7	1,7
C - Br_{16}	1,7
μ_D	4,44D

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

FIGURE : 116

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,306	0,759	0
3	1,271	2,110	- 0,721
4	- 0,081	2,906	- 0,464
5	- 1,162	2,210	0,470
6	- 1,306	0,759	0
7 Br_{ax}	2,014	0,866	1,803
8	2,029	0,105	- 0,476
9	2,761	3,202	- 0,199
10	1,477	1,816	- 2,607
11	0,125	3,935	- 0,070
12	- 0,556	3,027	- 1,472
13	- 0,664	2,338	2,320
14	- 2,827	3,146	0,281
15 Br_{eq}	- 2,633	- 0,177	1,061
16	- 1,672	0,744	- 1,021
17	0,003	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	119,69	13.5.6	112,52
1.2.3	115,05	14.5.4	111,17
2.3.4	113,56	14.5.6	110,49
i	28,07	15.6.5	110,70
i'	17,86	15.6.1	110,46
1.6.5	113,23	16.6.5	109,44
7.2.1	110,11	16.6.1	106,59
7.2.3	113,36	17.1.6	120,31
8.2.1	105,89	17.1.2	120,00
8.2.3	109,87	7.2.8	101,41
9.3.2	110,87	9.3.10	105,68
9.3.4	111,98	11.4.12	107,15
10.3.2	108,97	13.5.14	106,67
10.3.4	111,67	15.6.16	106,09
11.4.3	115,25	4.5.6	107,39
11.4.5	112,61	3.4.5	116,97
12.4.3	109,41		
12.4.5	110,49		
13.5.4	113,88		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	31,29	3.4.5.6	47,04
6.1.2.7	98,30	3.4.5.14	166,53
6.1.2.8	152,84	3.4.5.13	76,44
17.1.2.3	148,71	11.4.5.6	173,87
17.1.2.7	81,70	11.4.5.14	66,65
17.1.2.8	27,16	11.4.5.13	50,39
1.2.3.4	39,32	12.4.5.6	70,91
1.2.3.9	162,24	12.4.5.14	48,58
1.2.3.10	81,85	12.4.5.13	165,62
7.2.3.4	88,65	4.5.6.1	56,36
7.2.3.9	34,26	4.5.6.15	178,96
7.2.3.10	150,17	4.5.6.16	62,39
8.2.3.4	158,68	13.4.5.1	66,27
8.2.3.9	78,40	13.4.5.15	58,40
8.2.3.10	37,51	13.4.5.16	174,98
2.3.4.5	0	14.4.5.1	174,62
2.3.4.11	125,60	14.4.5.15	60,71
2.3.4.12	118,50	14.4.5.16	55,88
9.3.4.5	123,76	5.6.1.2	19,49
9.3.4.11	1,83	16.6.1.2	100,89
9.3.4.12	117,73	15.6.1.2	144,29
10.3.4.5	121,12	15.6.1.17	35,71
10.3.4.11	113,28	16.6.1.17	79,11
10.3.4.12	2,62	5.6.1.17	160,51

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone αα' dibromée

isomère cis

27 variables

conformation bateau déformé

fonctions du tableau 8

Energie (Kcal/mole)	
Wa	18,744
Wb	6,043
Wd	4,928
Wdp	8,383
ΣW	38,097
W_L	- 0,249
$\Sigma W+W_L$	37,848

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br_7	2,2
C - Br_{15}	1,9
μ_D	4,29D

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

FIGURE : 117

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
2	0	0	0
3	1,275	0,850	0
4	1,212	2,056	0,942
5	- 0,018	2,043	1,856
6	- 1,329	1,893	1,078
1	- 1,256	0,838	0
17	- 2,171	0,697	- 0,803
7Br	- 3,194	- 1,493	1,239
8	- 0,013	- 0,616	- 0,893
9	2,777	- 0,273	0,411
10	1,597	1,453	- 1,794
11	2,155	2,136	1,543
12	1,203	2,987	0,317
14	- 0,102	3,665	2,878
13	0,169	0,698	3,212
15	- 2,158	1,703	1,751
16Br	- 1,695	3,565	0,164

Angles (d°)			
1.2.3.	112,62	13.5.4	110,21
2.3.4.	113,74	13.5.6	108,40
3.4.5	113,14	14.5.4	110,46
i	37,94	14.5.6	111,94
i'	45,54	15.6.5	110,87
2.1.6	115,30	15.6.1	110,91
17.1.6	120,82	16.6.5	108,45
7.2.1	114,40	16.6.1	105,98
7.2.3	116,13	17.1.2	123,88
8.2.1	107,76	7.2.8	95,06
8.2.3	108,97	9.3.10	104,60
9.3.2	109,05	11.4.12	104,24
9.3.4	111,19	13.5.14	102,73
10.3.4	109,53	15.6.16	107,37
11.4.3	110,54	4.5.6	112,60
11.4.5	110,86	1.6.5	112,96
12.4.3	108,13		
12.4.5	109,51		
10.3.2	108,29		

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	32,26	3.4.5.13	72,51
7.2.3.10	145,54	3.4.5.6	53,47
7.2.3.4	92,46	14.5.6.15	68,26
8.2.3.9	73,56	14.5.6.16	49,39
8.2.3.10	39,71	14.5.6.5	166,55
8.2.3.4	161,72	13.5.6.15	44,36
1.2.3.9	166,92	13.5.6.16	162,01
1.2.3.10	79,81	13.5.6.5	80,84
1.2.3.4	42,20	4.5.6.15	169,54
9.3.4.11	106,95	4.5.6.16	72,81
9.3.4.12	124,22	4.5.6.5	44,34
9.3.4.5	114,31	15.6.1.2	117,24
10.3.4.11	104,42	16.6.1.2	126,53
10.3.4.12	9,11	5.6.1.2	7,93
10.3.4.5	130,58	15.6.1.17	62,76
2.3.4.11	134,26	16.6.1.17	53,46
2.3.4.12	112,21	5.6.1.17	172,07
2.3.4.5	9,26	6.1.2.7	83,35
11.4.5.14	60,52	6.1.2.8	172,35
11.4.5.13	52,32	6.1.2.3	52,13
11.4.5.6	178,31	17.1.2.7	96,66
12.4.5.14	53,96	17.1.2.8	7,65
12.4.5.13	166,80	17.1.2.3	127,87
12.4.5.6	67,22		
3.4.5.14	174,65		

tetraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone
αα' dibromée

isomère trans

conformation bateau dissymétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa	22,709
Wb	8,970
Wd	4,805
Wdp	9,233
ΣW	45,717
W_L	- 0,876
$\Sigma W + W_L$	44,841

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br_7	2,2
C - Br_{16}	2,2

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	5 10^{-3} kcal

FIGURE : 118

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
2	0	0	0
3	1,271	0,856	0
4	1,243	1,950	1,071
5	- 0,059	1,938	1,889
6	- 1,336	1,923	1,053
1	- 1,253	0,843	0
17	- 2,150	0,658	- 0,813
7	0	- 0,701	0,828
8 Br	0	- 1,253	- 1,481
9	2,841	- 0,237	0,168
10	1,607	1,597	- 1,739
11	2,142	1,888	1,737
12	1,427	2,961	0,622
14	- 0,086	4,141	3,172
13	- 0,040	- 0,125	3,178
15	- 2,211	1,790	1,681
16 Br	- 1,671	3,657	0,252

Angles (d°)			
1.2.3.	112,10	13.5.4	111,23
2.3.4.	112,57	13.5.6	111,23
3.4.5	112,53	14.5.4	111,17
i	44,36	14.5.6	111,17
i'	44,20	15.6.5	111,15
2.1.6	116,42	15.6.1	111,15
17.1.6	122,03	16.6.5	111,15
7.2.1	111,16	16.6.1	111,15
7.2.3	111,16	17.1.2	121,55
8.2.1	111,15	7.2.8	99,48
8.2.3	111,15	9.3.10	98,96
9.3.2	111,14	11.4.12	98,97
9.3.4	111,14	13.5.14	117,80
10.3.4	111,14	15.6.16	102,07
11.4.3	111,15	4.5.6	114,63
11.4.5	111,15	1.6.5	109,98
12.4.3	111,15		
12.4.5	111,15		
10.3.2	111,14		

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	49,52	3.4.5.13	67,05
7.2.3.10	158,70	3.4.5.6	50,57
7.2.3.4	75,89	14.5.6.15	70,84
8.2.3.9	60,30	14.5.6.16	42,12
8.2.3.10	48,88	14.5.6.5	165,64
8.2.3.4	174,29	13.5.6.15	55,32
1.2.3.9	174,62	13.5.6.16	168,28
1.2.3.10	76,20	13.5.6.5	68,20
1.2.3.4	49,21	4.5.6.15	172,94
9.3.4.11	0,20	4.5.6.16	74,10
9.3.4.12	108,97	4.5.6.5	49,43
9.3.4.5	125,63	15.6.1.2	121,81
10.3.4.11	109,41	16.6.1.2	125,24
10.3.4.12	0,16	5.6.1.2	1,71
10.3.4.5	125,19	15.6.1.17	58,19
2.3.4.11	125,18	16.6.1.17	54,76
2.3.4.12	125,62	5.6.1.17	178,29
2.3.4.5	0,18	6.1.2.7	73,98
11.4.5.14	67,81	6.1.2.8	176,20
11.4.5.13	58,35	6.1.2.3	51,13
11.4.5.6	175,98	17.1.2.7	106,02
12.4.5.14	41,39	17.1.2.8	3,80
12.4.5.13	167,55	17.1.2.3	128,87
12.4.5.6	74,83		
3.4.5.14	166,79		

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone
αα' dibromée

isomère cis

conformation bateau dissymétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa	20,789
Wb	8,121
Wd	4,285
Wdp	8,760
ΣW	41,955
W_L	- 0,520
$\Sigma W + W_L$	41,435

μ (D)	
C = O	2,8
C - Br_8	1,9
C - Br_{16}	2,2

$\Delta\theta_{2.1.6}$	17'
ΔW	1 kcal

FIGURE : 119

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
2	0	0	0
3	1,268	0,859	0
4	1,254	1,926	1,100
5	- 0,047	2,132	1,882
6	- 1,296	1,969	1,010
1	- 1,250	0,847	0
17	- 2,187	0,654	- 0,766
7 Br	0,008	- 1,438	1,302
8	- 0,019	- 0,555	- 0,934
9	2,824	- 0,258	0,132
10	1,386	1,728	- 1,710
11	2,100	1,733	1,809
12	1,637	2,911	0,726
14	- 0,002	3,869	2,700
13	- 0,107	0,909	3,361
15 Br	- 2,874	1,796	2,125
16	- 1,511	2,877	0,456

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone

$\alpha\alpha^1$-dibromée

- isomère cis -

conformation bateau dissymétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
1.2.3.	111,76	13.5.4	108,63
2.3.4.	112,50	13.5.6	110,98
3.4.5	117,94	14.5.4	109,51
i	45,87	14.5.6	110,20
i'	41,96	15.6.5	110,19
2.1.6	116,22	15.6.1	110,03
17.1.6	120,80	16.6.5	111,30
7.2.1	114,35	16.6.1	106,66
7.2.3	114,77	17.1.2	122,98
8.2.1	105,74	7.2.8	101,54
8.2.3	107,46	9.3.10	105,94
9.3.2	110,15	11.4.12	95,97
9.3.4	111,32	13.5.14	104,43
10.3.4	108,91	15.6.16	101,90
11.4.3	109,12	4.5.6	112,75
11.4.5	109,95	1.6.5	115,81
12.4.3	111,68	10 .2.3	107,73
12.4.5	109,99		

Energie (kcal/mole)	
Wa	18,421
Wb	8,925
Wd	5,456
Wdp	9,232
ΣW	42,034
W_L	-0,249
$\Sigma W+W_L$	41,785

$\Delta\theta_{2.1.6}$	4'
ΔW	0,02 kcal

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	43,49	3.4.5.13	86,76
7.2.3.10	158,61	3.4.5.6	36,31
7.2.3.4	81,34	14.5.6.15	72,16
8.2.3.9	68,61	14.5.6.16	40,13
8.2.3.10	46,51	14.5.6.5	162,17
8.2.3.4	166,56	13.5.6.15	43,02
1.2.3.9	175,81	13.5.6.16	155,30
1.2.3.10	69,07	13.5.6.5	82,66
1.2.3.4	50,98	4.5.6.15	165,71
9.3.4.11	6,66	4.5.6.16	82,02
9.3.4.12	98,19	4.5.6.5	40,04
9.3.4.5	132,98	15.6.1.2	124,06
10.3.4.11	123,11	16.6.1.2	126,17
10.3.4.12	18,26	5.6.1.2	1,69
10.3.4.5	110,57	15.6.1.17	55,94
2.3.4.11	117,52	16.6.1.17	53,83
2.3.4.12	137,63	5.6.1.17	178,31
2.3.4.5	8,79	6.1.2.7	84,35
11.4.5.14	74,32	6.1.2.8	164,81
11.4.5.13	39,16	6.1.2.3	48,18
11.4.5.6	162,24	17.1.2.7	95,65
12.4.5.14	30,13	17.1.2.8	15,19
12.4.5.13	143,61	17.1.2.3	131,82
12.4.5.6	93,31		
3.4.5.14	159,76		

μ(D)	
C = O	3,1
C - Br_7	2,2
C - Br_{15}	2,2

FIGURE 120

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
2	0	0	0
3	1,271	0,855	0
4	1,206	1,940	1,080
5	-0,063	1,847	1,934
6	-1,334	1,894	1,081
1	-1,253	0,843	0
17	-2,149	0,689	-0,821
7	0,019	-0,757	0,777
8 Br	-0,003	-1,210	-1,517
9	2,811	-0,262	0,261
10	1,499	1,649	-1,733
11	2,116	1,869	1,731
12	1,298	2,956	0,616
14	-0,086	3,313	3,174
13	-0,009	0,388	3,180
15 Br	-2,872	1,579	2,220
16	-1,462	2,877	0,638

tétraméthyl-3,3,5,5 cyclohexanone

$\alpha\alpha'$-dibromée

- isomère trans -

conformation bateau dissymétrique

27 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
1.2.3.	112,15	13.5.4	108,92
2.3.4.	111,08	13.5.6	109,03
3.4.5	112,69	14.5.4	112,60
i	44,83	14.5.6	114,07
i'	45,71	15.6.5	108,99
2.1.6	115,67	15.6.1	110,50
17.1.6	121,85	16.6.5	110,66
7.2.1	113,83	16.6.1	110,18
7.2.3	112,00	17.1.2	122,48
8.2.1	110,28	7.2.8	97,20
8.2.3	110,45	9.3.10	105,53
9.3.2	109,93	11.4.12	103,33
9.3.4	110,50	13.5.14	99,31
10.3.4	110,43	15.6.16	107,04
11.4.3	109,28	4.5.6	112,01
11.4.5	110,17	1.6.5	109,45
12.4.3	110,27	10.3.2	109,22
12.4.5	110,69		

Energie (kcal/mole)	
Wa	20,704
Wb	8,306
Wd	4,328
Wdp	8,202
ΣW	41,540
W_L	-0,239
$\Sigma W+W_L$	41,300

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2''
ΔW	0,02 kcal

Dièdres (d°)			
7.2.3.9	42,30	3.4.5.13	74,32
7.2.3.10	157,63	3.4.5.6	55,83
7.2.3.4	80,33	14.5.6.15	65,44
8.2.3.9	64,85	14.5.6.16	52,00
8.2.3.10	50,48	14.5.6.5	173,61
8.2.3.4	172,52	13.5.6.15	44,53
1.2.3.9	171,70	13.5.6.16	161,98
1.2.3.10	72,96	13.5.6.5	76,42
1.2.3.4	49,08	4.5.6.15	173,92
9.3.4.11	3,87	4.5.6.16	68,63
9.3.4.12	116,80	4.5.6.5	52,98
9.3.4.5	118,95	15.6.1.2	119,47
10.3.4.11	112,50	16.6.1.2	122,45
10.3.4.12	0,40	5.6.1.2	0,55
10.3.4.5	124,67	15.6.1.17	60,53
2.3.4.11	126,17	16.6.1.17	57,55
2.3.4.12	120,91	5.6.1.17	179,45
2.3.4.5	3,33	6.1.2.7	75,87
11.4.5.14	61,14	6.1.2.8	176,11
11.4.5.13	48,01	6.1.2.3	52,57
11.4.5.6	178,17	17.1.2.7	104,13
12.4.5.14	52,52	17.1.2.8	3,89
12.4.5.13	161,67	17.1.2.3	127,43
12.4.5.6	68,18		
3.4.5.14	176,52		

μ(D)	
C = O	2,8
C - Br_8	1,9
C - Br_{15}	2,2

FIGURE : 121

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,285	0,839	0
3	1,030	2,253	0,542
4	0	2,988	- 0,350
5	- 1,030	2,253	0,542
6	- 1,285	0,839	0
7	0	2,160	1,697
8	0	4,890	- 0,094
9	0	2,627	- 2,236
10	2,024	0,338	0,676
11	1,782	0,852	- 1,004
12	1,956	2,817	0,770
13	- 1,956	2,817	0,770
14	0	3,033	2,353
15	0	1,223	2,258
16	- 2,024	0,338	0,676
17	- 1,782	0,852	- 1,004
18	0	- 0,607	0,941
19	0	- 0,766	- 0,817

Angles (d°)	
2.1.6	113,72
1.2.3	111,37
2.3.4	110,11
3.4.5	83,38
1.2.10	107,96
1.2.11	112,24
12.3.4	115,64
3.4.8	113,15
3.4.9	118,50
3.7.14	113,53
3.7.15	115,75
18.1.2	107,24
19.1.2	111,95
2.3.7	108,53
4.3.7	90,94
3.7.5	83,25
10.2.11	104,67
2.3.12	113,73
8.4.9	108,52
14.7.15	112,18
18.1.19	104,02

Dièdres (d°)	
18.1.2.3	96,12
18.1.2.11	137,08
18.1.2.10	22,23
6.1.2.3	22,27
6.1.2.11	104,54
6.1.2.10	140,62
19.1.2.3	150,40
19.1.2.11	23,59
19.1.2.10	91,25
10.2.3.7	81,32
10.2.3.4	179,44
10.2.3.12	48,92
1.2.3.7	37,03
1.2.3.4	61,09
1.2.3.12	167,27
11.2.3.7	163,84
11.2.3.4	65,72
11.2.3.12	65,92
12.3.4.8	32,11
12.3.4.5	144,50
12.3.4.9	96,59
7.3.4.8	87,10
7.3.4.5	25,29
7.3.4.9	144,20
2.3.4.8	162,75
2.3.4.5	84,87
2.3.4.9	34,05
4.3.7.14	87,50
4.3.7.15	140,64
4.3.7.5	25,26
12.3.7.14	31,71
12.3.7.15	100,15
12.3.7.5	144,47
2.3.7.14	160,89
2.3.7.15	29,04
2.3.7.5	86,35

Longueurs de Liaisons (Å)	
$C_1 - C_2$	1,534
$C_2 - C_3$	1,536

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	13,002
Wb . . .	67,070
Wd . . .	10,171
ΣW . . .	90,243

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,002kcal

apopinane

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptane

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

14 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 122

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,295	0,823	0
3	1,023	2,333	- 0,075
4	0	2,611	- 1,202
5	- 1,023	2,333	- 0,075
6	- 1,295	0,823	0
7	0	2,718	1,023
8	0	4,457	- 1,730
9	0	1,374	- 2,670
10	1,920	0,577	0,896
11	1,987	0,492	- 0,816
12	1,955	2,932	- 0,104
13	- 1,955	2,932	- 0,104
14	0	3,781	1,274
15	0	2,088	1,914
16	- 1,920	0,577	0,896
17	- 1,987	0,492	- 0,816
18	0	- 0,675	0,893
19	0	- 0,719	- 0,858

Angles (d°)	
2.1.6	115,14
1.2.3	112,22
2.3.4	109,23
3.4.5	82,77
1.2.10	110,71
1.2.11	111,32
12.3.4	116,00
3.4.8	111,89
3.4.9	116,10
3.7.14	113,86
3.7.15	115,74
18.1.2	108,87
19.1.2	110,15
2.3.7	109,05
4.3.7	91,95
3.7.5	82,68
10.2.11	99,93
2.3.12	112,63
8.4.9	114,15
14.7.15	111,92
18.1.19	102,94

Dièdres (d°)	
18.1.2.3	125,57
18.1.2.11	108,90
18.1.2.10	1,32
6.1.2.3	3,03
6.1.2.11	128,56
6.1.2.10	121,22
19.1.2.3	122,24
19.1.2.11	3,29
19.1.2.10	113,50
10.2.3.7	72,99
10.2.3.4	172,13
10.2.3.12	57,35
1.2.3.7	51,26
1.2.3.4	47,87
1.2.3.12	178,40
11.2.3.7	176,79
11.2.3.4	77,66
11.2.3.12	52,87
12.3.4.8	33,91
12.3.4.5	144,70
12.3.4.9	99,64
7.3.4.8	86,48
7.3.4.5	24,32
7.3.4.9	139,97
2.3.4.8	162,55
2.3.4.5	86,65
2.3.4.9	29,00
4.3.7.14	88,66
4.3.7.15	139,44
4.3.7.5	24,29
12.3.7.14	31,74
12.3.7.15	100,15
12.3.7.5	144,69
2.3.7.14	160,20
2.3.7.15	28,30
2.3.7.5	86,85

Longueurs de Liaisons (Å)	
$C_1 - C_2$	1,534
$C_2 - C_3$	1,536

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	17,262
Wb . . .	66,073
Wd . . .	11,818
ΣW . . .	95,153

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,1 kcal

apopinane

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptane

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

14 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 123

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,278	0,845	0
3	1,022	2,250	0,565
4	0	3,066	- 0,264
5	- 1,022	2,250	0,565
6	- 1,278	0,845	0
7	0	2,083	1,719
8	0	4,940	0,153
9	0	2,905	- 2,177
10	2,032	0,338	0,654
11	1,764	0,877	- 1,009
12	1,954	2,787	0,831
13	- 1,954	2,787	0,831
14	0	2,915	2,425
15	0	1,098	2,191
16	- 2,032	0,338	0,654
17	- 1,764	0,877	- 1,009
18	0	- 0,669	0,899
19	0	- 0,688	- 0,883

Angles (d°)	
2.1.6	113,04
1.2.3	111,44
2.3.4	113,27
3.4.5	82,61
1.2.10	108,16
1.2.11	112,18
12.3.4	115,36
3.4.8	113,48
3.4.9	119,29
3.7.14	113,52
3.7.15	114,79
18.1.2	109,23
19.1.2	109,82
2.3.7	106,55
4.3.7	91,16
3.7.5	82,48
10.2.11	104,29
2.3.12	113,04
8.4.9	107,34
14.7.15	114,07
18.1.19	105,42

Dièdres (d°)	
18.1.2.3	98,54
18.1.2.11	134,72
18.1.2.10	20,24
6.1.2.3	23,29
6.1.2.11	103,45
6.1.2.10	142,06
19.1.2.3	146,31
19.1.2.11	19,57
19.1.2.10	94,91
10.2.3.7	81,89
10.2.3.4	179,46
10.2.3.12	45,85
1.2.3.7	36,89
1.2.3.4	61,78
1.2.3.12	164,62
11.2.3.7	163,63
11.2.3.4	64,96
11.2.3.12	68,64
12.3.4.8	32,92
12.3.4.5	145,35
12.3.4.9	95,11
7.3.4.8	86,01
7.3.4.5	26,43
7.3.4.9	145,96
2.3.4.8	165,40
2.3.4.5	82,17
2.3.4.9	37,37
4.3.7.14	86,03
4.3.7.15	140,28
4.3.7.5	26,40
12.3.7.14	32,90
12.3.7.15	100,79
12.3.7.5	145,33
2.3.7.14	159,25
2.3.7.15	25,56
2.3.7.5	88,32

Longueurs de Liaisons (Å)	
$C_1 - C_2$	1,532
$C_2 - C_3$	1,536

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	10,872
Wb . . .	69,229
Wd . . .	10,300
ΣW . . .	90,401

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,1kcal

apopinane

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptane

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

14 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 124

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,288	0,834	0
3	1,058	2,283	- 0,454
4	0	2,360	- 1,582
5	- 1,058	2,283	- 0,454
6	- 1,288	0,834	0
7	0	2,895	0,500
8	0	4,003	- 2,574
9	0	0,833	- 2,746
10	1,773	0,810	1,009
11	2,068	0,345	- 0,638
12	1,979	2,879	- 0,609
13	- 1,979	2,879	- 0,609
14	0	3,987	0,459
15	0	2,457	1,500
16	- 1,773	0,810	1,009
17	- 2,068	0,345	- 0,638
18	0	- 0,618	0,934
19	0	- 0,842	- 0,739

Angles (d°)	
2.1.6	114,13
1.2.3	112,79
2.3.4	111,35
3.4.5	86,18
1.2.10	110,59
1.2.11	110,35
12.3.4	116,13
3.4.8	114,76
3.4.9	113,74
3.7.14	111,81
3.7.15	113,89
18.1.2	107,45
19.1.2	114,13
2.3.7	107,03
4.3.7	87,87
3.7.5	86,04
10.2.11	101,63
2.3.12	115,08
8.4.9	111,54
14.7.15	115,82
18.1.19	97,77

Dièdres (d°)	
18.1.2.3	137,73
18.1.2.11	98,35
18.1.2.10	133,10
6.1.2.3	18,70
6.1.2.11	142,62
6.1.2.10	105,72
19.1.2.3	115,04
19.1.2.11	8,88
19.1.2.10	120,54
10.2.3.7	66,75
10.2.3.4	161,22
10.2.3.12	63,94
1.2.3.7	57,67
1.2.3.4	36,80
1.2.3.12	171,63
11.2.3.7	178,41
11.2.3.4	87,13
11.2.3.12	47,71
12.3.4.8	28,48
12.3.4.5	144,04
12.3.4.9	101,66
7.3.4.8	89,72
7.3.4.5	25,84
7.3.4.9	140,14
2.3.4.8	162,81
2.3.4.5	81,63
2.3.4.9	32,67
4.3.7.14	86,12
4.3.7.15	140,23
4.3.7.5	25,81
12.3.7.14	32,09
12.3.7.15	101,57
12.3.7.5	144,01
2.3.7.14	162,19
2.3.7.15	28,53
2.3.7.5	85,89

Longueurs de Liaisons (Å)	
$C_1 - C_2$	1,534
$C_2 - C_3$	1,536

Energié (kcal/mole)	
Wa . . .	16,595
Wb . . .	67,757
Wd . . .	11,407
ΣW . . .	95,758

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	2.10^{-3}kcal

apopinane

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptane

14 variables

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

fonctions

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

C---Me
H---Me tableau 8

FIGURE : 125

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,283	0,841	0
3	1,024	2,283	0,462
4	0	3,025	- 0,431
5	- 1,024	2,283	0,462
6	- 1,283	0,841	0
7	0	2,212	1,624
8	0	4,924	- 0,148
9	0	2,664	- 2,317
10	2,031	0,367	0,685
11	1,786	0,818	- 1,000
12	1,954	2,842	0,683
13	- 1,954	2,842	0,683
14	0	3,098	2,261
15	0	1,284	2,201
16	- 2,031	3,668	0,685
17	- 1,786	0,818	- 1,000
18	0	- 0,709	0,867
19	0	- 0,725	- 0,854

Angles (d°)	
2.1.6	113,48
1.2.3	111,95
2.3.4	112,82
3.4.5	82,81
1.2.10	109,04
1.2.11	111,36
12.3.4	115,38
3.4.8	112,90
3.4.9	118,45
3.7.14	113,57
3.7.15	115,79
18.1.2	110,31
19.1.2	110,79
2.3.7	107,06
4.3.7	91,01
3.7.5	82,68
10.2.11	103,72
2.3.12	113,09
8.4.9	109,33
14.7.15	112,39
18.1.19	100,40

Dièdres (d°)	
18.1.2.3	105,43
18.1.2.11	129,17
18.1.2.10	15,32
6.1.2.3	18,93
6.1.2.11	106,47
6.1.2.10	139,68
19.1.2.3	144,30
19.1.2.11	18,91
19.1.2.10	94,95
10.2.3.7	81,57
10.2.3.4	179,92
10.2.3.12	46,62
1.2.3.7	39,18
1.2.3.4	59,40
1.2.3.12	167,37
11.2.3.7	164,57
11.2.3.4	65,99
11.2.3.12	67,24
12.3.4.8	33,34
12.3.4.5	145,20
12.3.4.9	96,27
7.3.4.8	85,54
7.3.4.5	26,33
7.3.4.9	144,86
2.3.4.8	165,44
2.3.4.5	82,69
2.3.4.9	35,84
4.3.7.14	86,28
4.3.7.15	141,46
4.3.7.5	26,30
12.3.7.14	32,60
12.3.7.15	99,67
12.3.7.5	145,17
2.3.7.14	159,44
2.3.7.15	27,18
2.3.7.5	87,98

Longueurs de Liaisons (Å)	
$C_1 - C_2$	1,534
$C_2 - C_3$	1,536

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	8,202
Wb . . .	68,307
Wd . . .	10,589
ΣW . . .	87,097

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	$5 \cdot 10^{-3}$ kcal

apopinane

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptane

14 variables

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geqslant 2,4$Å

$-10,162r + 24,29$ $r < 2,4$Å

C---Me
H---Me tableau 8

FIGURE : 126

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,284	0,836	0
3	1,068	2,159	0,750
4	0	2,897	- 0,093
5	- 1,068	2,159	0,750
6	- 1,284	0,836	0
7	0	1,852	1,791
8	0	4,803	0,135
9	0	2,692	- 2,002
10	2,100	0,257	0,502
11	1,754	0,953	- 1,010
12	2,118	2,477	0,904
13	- 2,118	2,477	0,904
14	0	2,345	2,765
15	0	0,382	2,279
16	- 2,100	0,257	0,502
17	- 1,754	0,953	- 1,010
18	0	- 0,777	0,807
19	0	- 0,691	- 0,882

Angles (d°)	
2.1.6	113,86
1.2.3	110,63
2.3.4	103,98
3.4.5	87,29
1.2.10	109,19
1.2.11	114,15
12.3.4	126,35
3.4.8	114,13
3.4.9	119,36
3.7.14	119,02
3.7.15	122,85
18.1.2	112,25
19.1.2	109,67
2.3.7	104,72
3.7.5	88,19

Longueurs de liaisons (Å)	
$C_1 - C_2$	1,532
$C_2 - C_3$	1,536

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 1,810
Wb . .	87,419
Wdp. .	10,178
ΣW . .	95,787

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptane (apopinane)

14 variables

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geqslant 2,4$Å

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4$Å

H---Me $-2,25 \times 0,117 \times (3,50/r)^6 + 8,28 \times 0,117e^{-r/(0,0736 \times 3,50)}$

C---Me $-2,25$ $0,65 \times 0,326 \times (3,25/r)^6 + 8,28\ 10^5$ $0,65 \times 0,326\ e^{-r/(0,0736 \times 3,25)}$

FIGURE : 127

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,280	0,841	0
3	0,976	2,238	0,562
4	0	2,899	- 0,441
5	0,976	2,238	0,562
6	1,280	0,841	0
7	0	2,160	1,536
8	0	4,812	- 0,443
9	0	2,489	- 2,316
10	2,081	0,340	0,602
11	1,812	0,856	- 0,986
12	1,986	2,692	0,607
13	- 1,986	2,692	0,607
14	0	2,799	2,421
15	0	1,182	2,078
16	- 2,081	0,340	0,602
17	- 1,812	0,856	- 0,986
18	0	- 0,775	0,808
19	0	- 0,712	- 0,864

Angles (d°)	
2.1.6	113,39
1.2.3	109,49
2.3.4	106,03
3.4.5	78,18
1.2.10	110,59
1.2.11	113,82
6.3.12	115,17
3.6.8	115,33
3.6.9	122,79
2.1.18	112,33
2.1.18	110,43
3.7.5	89,87
2.3.7	94,06
3.7.14	109,48
8.7.15	117,66

Longueurs de liaisons (Å)	
$C_1 - C_2$	1,532
$C_2 - C_3$	1,536

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	11,973
Wb . .	67,967
Wdp. .	10,936
ΣW . .	90,876

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptane (apopinane)

14 variables

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geqslant 2,4$ Å

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4$ Å

C---Me $0,11e^{3,76(3,85 - r)}$

H---Me $0,1e^{4,13(3,50 - r)}$

FIGURE : 128

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,288	0,834	0
3	1,040	2,204	0,588
4	0	2,944	- 0,296
5	- 1,040	2,204	0,588
6	- 1,288	0,834	0
7	0	2,069	1,734
8	0	4,022	- 0,124
9	0	2,656	- 1,348
10	2,082	0,306	0,587
11	1,675	0,934	- 1,046
12	1,953	2,780	0,837
13	- 1,953	2,780	0,837
14	0	2,924	2,412
15	0	1,111	2,255
16	- 2,082	0,306	0,587
17	- 1,675	0,934	- 1,046
18	0	- 0,648	0,913
19	0	- 0,700	- 0,874

Angles (d°)	
2.1.6	114,14
1.2.3	110,81
2.3.4	108,68
3.4.5	84,09
1.2.10	109,84
1.2.11	109,83
12.3.4	115,58
3.4.8	112,43
3.4.9	115,05
3.7.14	112,98
3.7.15	115,37
18.1.2	108,34
19.1.2	109,86
2.3.7	108,57
4.3.7	90,72
3.7.5	84,09
10.2.11	106,61
2.3.12	115,05
8.4.9	114,33
14.7.15	113,03
18.1.19	105,94

Dièdres (d°)	
18.1.2.3	96,17
18.1.2.11	142,31
18.1.2.10	25,37
6.1.2.3	24,62
6.1.2.11	96,90
6.1.2.10	146,16
19.1.2.3	148,52
19.1.2.11	27,00
19.1.2.10	89,94
10.2.3.7	86,15
10.2.3.4	176,53
10.2.3.12	45,14
1.2.3.7	35,40
1.2.3.4	61,93
1.2.3.12	166,68
11.2.3.7	156,91
11.2.3.4	59,59
11.2.3.12	71,80
12.3.4.8	31,18
12.3.4.5	143,03
12.3.4.9	102,04
7.3.4.8	87,82
7.3.4.5	24,04
7.3.4.9	138,96
2.3.4.8	162,28
2.3.4.5	85,87
2.3.4.9	29,06
4.3.7.14	88,46
4.3.7.15	139,36
4.3.7.5	24,04
12.3.7.14	30,54
12.3.7.15	101,65
12.3.7.5	143,03
2.3.7.14	161,54
2.3.7.15	29,35
2.3.7.5	85,97

Longueurs de Liaisons (Å)	
$C_1 - C_2$	1,534
$C_2 - C_3$	1,511

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	2,590
Wb . . .	60,790
Wd . . .	10,477
ΣW . . .	73,857

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	10^{-3}kcal

bicyclo (3.1.1) heptane

14 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 129

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,284	0,840	0
3	1,035	2,233	0,598
4	0	2,965	- 0,299
5	- 1,035	2,233	0,598
6	- 1,284	0,840	0
7	0	2,111	1,749
8	0	4,043	- 0,129
9	0	2,681	- 1,353
10	2,083	0,314	0,582
11	1,663	0,945	- 1,049
12	1,949	2,811	0,839
13	- 1,949	2,811	0,839
14	0	2,979	2,411
15	0	1,165	2,293
16	- 2,083	0,314	0,582
17	- 1,663	0,945	- 1,049
18	0	- 0,642	0,917
19	0	- 0,715	- 0,862

Angles (d°)	
2.1.6	113,58
1.2.3	111,17
2.3.4	118,09
3.4.5	83,57
1.2.10	109,86
1.2.11	109,54
12.3.4	115,44
3.4.8	112,05
3.4.9	115,80
3.7.14	112,78
3.7.15	115,94
18.1.2	108,31
19.1.2	110,45
2.3.7	108,98
4.3.7	91,23
3.7.5	83,57
10.2.11	106,78
2.3.12	115,08
8.4.9	114,07
14.7.15	112,81
18.1.19	105,36

Dièdres (d°)	
18.1.2.3	95,69
18.1.2.11	143,11
18.1.2.10	26,12
6.1.2.3	24,67
6.1.2.11	96,53
6.1.2.10	146,48
19.1.2.3	149,40
19.1.2.11	28,20
19.1.2.10	88,78
10.2.3.7	86,33
10.2.3.4	175,84
10.2.3.12	45,17
1.2.3.7	35,49
1.2.3.4	62,34
1.2.3.12	166,98
11.2.3.7	156,69
11.2.3.4	58,85
11.2.3.12	71,82
12.3.4.8	31,94
12.3.4.5	143,15
12.3.4.9	101,25
7.3.4.8	87,13
7.3.4.5	24,08
7.3.4.9	139,67
2.3.4.8	162,42
2.3.4.5	86,36
2.3.4.9	29,23
4.3.7.14	87,96
4.3.7.15	139,84
4.3.7.5	24,08
12.3.7.14	31,12
12.3.7.15	101,08
12.3.7.5	143,15
2.3.7.14	162,42
2.3.7.15	30,22
2.3.7.5	85,54

Longueurs de Liaisons (Å)	
$C_1 - C_2$	1,534
$C_2 - C_3$	1,536

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	2,138
Wb . . .	61,192
Wd . . .	10,277
ΣW . . .	73,607

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	$0,0_1$kcal

FIGURE : 130

bicyclo (3.1.1) heptane

14 variables

fonctions du tableau 8

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,277	0,850	0
3	1,022	2,207	0,675
4	0	2,990	- 0,193
5	- 1,022	2,207	0,675
6	- 1,277	0,850	0
7	0	2,128	1,841
8	0	4,054	0,046
9	0	2,776	- 1,263
10	2,127	0,307	0,486
11	1,617	1,017	- 1,054
12	1,941	2,777	0,916
13	- 1,941	2,777	0,916
14	0	3,018	2,472
15	0	1,192	2,402
16	- 2,127	0,307	0,486
17	- 1,617	1,015	- 1,054
18	0	- 0,675	0,894
19	0	- 0,744	- 0,837

Angles (d°)	
2.1.6	112,67
1.2.3	110,59
2.3.4	107,98
3.4.5	82,35
1.2.10	111,30
1.2.11	109,54
12.3.4	114,10
3.4.8	111,67
3.4.9	116,68
3.7.14	113,14
3.7.15	115,45
18.1.2	109,51
19.1.2	111,61
2.3.7	113,21
4.3.7	90,68
3.7.5	82,35
10.2.11	104,39
2.3.12	114,38
8.4.9	114,00
14.7.15	113,72
18.1.19	101,32

Dièdres (d°)	
18.1.2.3	94,15
18.1.2.11	145,03
18.1.2.10	30,11
6.1.2.3	27,99
6.1.2.11	92,83
6.1.2.10	152,25
19.1.2.3	154,49
19.1.2.11	33,66
19.1.2.10	81,26
10.2.3.7	90,43
10.2.3.4	170,79
10.2.3.12	42,59
1.2.3.7	33,83
1.2.3.4	64,96
1.2.3.12	166,85
11.2.3.7	154,66
11.2.3.4	55,87
11.2.3.12	72,33
12.3.4.8	34,32
12.3.4.5	144,66
12.3.4.9	99,27
7.3.4.8	82,60
7.3.4.5	27,74
7.3.4.9	143,81
2.3.4.8	162,67
2.3.4.5	86,99
2.3.4.9	29,09
4.3.7.14	84,21
4.3.7.15	142,33
4.3.7.5	27,74
12.3.7.14	32,71
12.3.7.15	100,75
12.3.7.5	144,66
2.3.7.14	165,86
2.3.7.15	32,40
2.3.7.5	82,19

Longueurs de Liaisons (Å)	
$C_1 - C_2$	1,534
$C_2 - C_3$	1,536

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	- 4,321
Wb . . .	64,894
Wd . . .	9,264
ΣW . . .	69,836

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-3}kcal

FIGURE : 131

bicyclo (3.1.1) heptane

14 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geqslant 2,4$Å

$24,29 - 10,162r$ $r < 2,4$Å

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,283	0,841	0
3	1,037	2,218	0,571
4	0	2,939	- 0,332
5	- 1,037	2,218	0,571
6	- 1,283	0,841	0
7	0	2,158	1,725
8	0	4,024	- 0,211
9	0	2,613	- 1,373
10	2,095	2,613	- 1,373
11	1,679	0,319	0,568
12	1,946	2,811	0,796
13	- 1,946	2,811	0,796
14	0	3,055	2,345
15	0	1,222	2,286
16	- 2,095	0,319	0,568
17	- 1,679	0,928	- 1,044
18	0	- 0,711	0,865
19		- 0,736	- 0,844

Angles (d°)	
2.1.6	113,54
1.2.3	111,31
2.3.4	108,20
3.4.5	83,83
1.2.10	110,54
1.2.11	109,77
12.3.4	114,66
3.4.8	113,43
3.4.9	114,56
3.7.14	112,99
3.7.15	114,55
18.1.2	110,74
19.1.2	111,11
2.3.7	110,37
4.3.7	90,21
3.7.5	83,83
10.2.11	104,67
2.3.12	115,54
8.4.9	113,72
14.7.15	114,38
18.1.19	99,47

Longueurs de liaisons (Å)	
$C_1 - C_2$	1,534
$C_2 - C_3$	1,511

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 2,988
Wb . .	62,535
Wdp . .	10,295
ΣW . .	69,842

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	10^{-3} kcal

bicyclo (3.1.1) heptane

14 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

FIGURE : 132

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,288	0,834	0
3	1,031	2,234	- 0,578
4	0	2,114	- 1,733
5	- 1,031	2,234	- 0,578
6	- 1,288	0,834	0
7	0	2,961	0,328
8	0	- 0,648	0,913
9	0	- 0,700	- 0,874
10	1,685	0,920	1,044
11	2,077	0,314	- 0,601
12	0	4,043	0,190
13	1,942	2,820	- 0,809
14	0	1,123	- 2,189
15	0	2,945	- 2,440
16	0	2,655	1,375
17	- 1,942	2,820	- 0,809
18	- 1,685	0,920	1,044
19	- 2,077	0,314	- 0,601

Angles (d°)			
6.1.2	114,14	18.6.5	109,84
1.2.3	110,81	18.6.1	109,84
2.3.4	108,68	19.6.5	109,82
i	22,09	19.6.1	109,82
i'	22,09	12.7.3	112,99
1.6.5	110,81	12.7.5	112,99
2.3.7	108,56	16.7.3.	115,37
8.1.6	108,34	16.7.5	115,37
8.1.2	108,34	8.1.9	105,94
9.1.6	109,86	10.2.11	106,61
9.1.2	109,86	7.3.13	114,81
10.2.1	109,84	14.4.15	114,86
10.2.3	109,84	7.5.17	114,81
11.2.1	109,82	18.6.19	106,61
11.2.3	109,82	7.3.4	91,68
13.3.2	115,06	7.5.4	91,68
13.3.4	115,58	3.7.5.	83,19
14.4.3	112,43	12.7.16	113,57
14.4.5	112,43	6.5.7	108,56
15.4.3	115,05	3.4.5	83,19
15.4.5	115,05	6.5.4	108,68
17.5.4	115,58		
17.5.6	115,06		

Dièdres (d°)			
8.1.2.10	22,96	4.5.6.1	36,38
8.1.2.11	93,98	4.5.6.18	157,93
8.1.2.3	144,51	4.5.6.19	85,13
9.1.2.10	138,27	7.5.6.1	62,02
9.1.2.11	21,33	7.5.6.18	59,53
9.1.2.3	100,19	7.5.6.19	176,47
6.1.2.10	97,83	17.5.6.1	167,77
6.1.2.11	145,23	17.5.6.18	70,69
6.1.2.3	23,72	17.5.6.19	46,25
10.2.3.7	59,53	5.6.1.8	144,51
10.2.3.4	157,93	5.6.1.9	100,19
10.2.3.13	70,69	5.6.1.2	23,72
11.2.3.7	176,47	18.6.1.8	22,96
11.2.3.4	85,13	18.6.1.9	138,27
11.2.3.13	46,25	18.6.1.2	97,83
1.2.3.7	62,02	19.6.1.8	93,98
1.2.3.4	36,38	19.6.1.9	21.33
1.2.3.13	167,77	19.6.1.2	145,23
2.3.4.14	25,17	2.3.7.5	86,42
7.3.4.14	135,42	2.3.7.12	161,46
13.3.4.14	105,93	2.3.7.16	28,48
2.3.4.15	159,18	13.3.7.5	143,23
7.3.4.15	90,57	13.3.7.12	31,11
13.3.4.15	28,08	13.3.7.16	101,87
2.3.4.5	86,31	4.3.7.5	23,94
7.3.4.5	23,94	4.3.7.12	88,18
13.3.4.5	142,58	4.3.7.16	138,83
15.4.5.17	28,08	6.5.7.3	86,42
15.4.5.7	90,57	6.5.7.12	161.46
15.4.5.6	159,18	6.5.7.16	28,48
14.4.5.17	105,93	17.5.7.3	143,23
14.4.5.7	135,42	17.5.7.12	31,11
14.4.5.6	25,17	17.5.7.16	101,87
3.4.5.17	142,58	4.5.7.3	23,94
3.4.5.7	23,94	4.5.7.12	88,18
3.4.5.6	86,31	4.5.7.16	138,83

bicyclo (3.1.1) heptane

31 variables

fonctions du tableau 8

Longueurs de Liaisons (Å)	
$C_1 - C_2$	1,534
$C_2 - C_3$	1,536

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	10^{-3} kcal

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	2,481
Wb . . .	59,121
Wd . . .	11,137
ΣW . . .	72,739

FIGURE : 133

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,277	0,847	0
3	0,964	2,348	0,083
4	- 0,106	2,846	- 0,919
5	- 1,081	2,330	0,167
6	- 1,258	0,835	0
7	- 0,011	2,471	1,281
8	- 0,005	- 0,663	0,903
9	- 0,027	- 0,688	- 0,883
10	1,900	0,563	0,886
11	1,913	0,606	- 0,890
12	0,003	4,203	2,109
13	1,891	2,931	0,253
14	- 0,128	3,921	- 1,112
15	- 0,222	2,357	- 1,889
16	0,036	1,041	2,561
17	- 2,037	2,841	0,395
18	- 2,368	0,332	- 0,128

Angles (d°)			
2.1.6	112,89	17.5.4	122,23
1.2.3	111,77	17.5.6	112,15
2.3.4	114,84	18.6.5	121,50
i	3,08	12.7.3	113,57
i'	6,34	12.7.5	113,41
1.6.5	116,60	16.7.3	116,18
2.3.7	104,29	16.7.5	115,37
8.1.6	108,87	18.6.1	121,90
8.1.2	109,33	10.2.11	104,97
9.1.6	108,64	7.3.13	111,47
9.1.2	111,10	14.4.15	106,33
10.2.1	108,86	7.5.17	113,95
10.2.3	108,57	8.1.9	105,75
11.2.1	110,78	4.3.7	92,27
11.2.3	111,61	4.5.7	92,27
13.3.2	110,62	3.7.5	82,63
13.3.4	120,59	12.7.16	112,57
14.4.3	116,40	6.5.7	104,48
14.4.5	116,07	3.4.5	82,76
15.4.3	120,29	4.5.6	108,99
15.4.5	114,02		

Dièdres (d°)			
8.1.2.10	1,89	4.5.6.1	154,91
8.1.2.11	116,84	17.5.6.1	166,58
8.1.2.3	118,02	7.5.6.1	42,68
9.1.2.10	114,44	4.5.6.18	125,09
9.1.2.11	0,49	17.5.6.18	13,42
9.1.2.3	125,64	7.5.6.18	137,32
6.1.2.10	123,24	5.6.1.8	114,50
6.1.2.11	121,83	5.6.1.9	130,79
6.1.2.3	3,31	5.6.1.2	7,09
10.2.3.7	69,59	18.6.1.8	65,50
10.2.3.4	168,96	18.6.1.9	49,21
10.2.3.13	50,37	18.6.1.2	172,91
11.2.3.7	175,19	2.3.7.5.	92,65
11.2.3.4	75,81	2.3.7.12	154,97
11.2.3.13	64,85	2.3.7.16	22,04
1.2.3.7	50,50	13.3.7.5	147,96
1.2.3.4	48,87	13.3.7.12	35,59
1.2.3.13	170,47	13.3.7.16	97,35
2.3.4.14	161,28	4.3.7.5	23,70
7.3.4.14	91,84	4.3.7.12	88,67
13.3.4.14	24,84	4.3.7.16	138,40
2.3.4.15	30,48	6.5.7.3	86,58
7.3.4.15	137,36	6.5.7.12	160,88
13.3.4.15	105,95	6.5.7.16	28,96
2.3.4.5	83,16	17.5.7.3	150,69
7.3.4.5	23,73	17.5.7.12	38,14
13.3.4.5	140,41	17.5.7.16	93,78
15.4.5.17	95,93	4.5.7.3	23,70
15.4.5.7	143,73	4.5.7.12	88,85
15.4.5.6	37,57	4.5.7.16	139,24
14.4.5.17	28,17		
14.4.5.7	92,18		
14.4.5.6	161,67		
3.4.5.17	144,07		
3.4.5.7	23,73		
3.4.5.6	82,43		

nopinone

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-2

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

28 variables

fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	24,176
Wb . . .	68,586
Wd . . .	9,827
ΣW . . .	102,590

$\Delta\theta_{2.1.6}$	4'
ΔW	10^{-2} kcal

FIGURE : 134

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,305	0,803	0
3	0,984	2,304	- 0,048
4	- 0,056	2,648	- 1,142
5	- 1,081	2,292	- 0,038
6	- 1,286	0,791	0
7	- 0,044	2,559	1,083
8	- 0,011	- 0,665	0,901
9	- 0,007	- 0,707	- 0,868
10	1,871	0,590	0,942
11	1,976	0,475	- 0,835
12	- 0,072	4,380	1,693
13	1,890	2,930	0,081
14	- 0,029	3,688	- 1,475
15	- 0,131	2,066	- 2,063
16	- 0,040	1,279	2,514
17	- 2,032	2,848	0,082
18	- 2,394	0,270	0,028

Angles (d°)			
2.1.6	116,78	17.5.4	121,98
1.2.3	109,55	17.5.6	112,25
2.3.4	112,29	18.6.5	123,01
i	1,79	12.7.3	113,40
i'	1,44	12.7.5	112,56
1.6.5	113,82	16.7.3	115,64
2.3.7	106,05	16.7.5	115,18
8.1.6	107,65	18.6.1	123,16
8.1.2	108,64	10.2.11	105,57
9.1.6	109,02	7.3.13	111,38
9.1.2	109,64	14.4.15	104,58
10.2.1	109,35	7.5.17	114,15
10.2.3	108,50	8.1.9	104,39
11.2.1	110,89	4.3.7	91,90
11.2.3	112,85	4.5.7	91,90
13.3.2	112,21	3.7.5	83,56
13.3.4	120,38	12.7.16	113,30
14.4.3	114,25	6.5.7	104,07
14.4.5	116,92	3.4.5	83,69
15.4.3	121,57	4.5.6	109,60
15.4.5	115,67		

Dièdres (d°)			
8.1.2.10	5,01	4.5.6.1	47,80
8.1.2.11	110,99	17.5.6.1	173,35
8.1.2.3	123,81	7.5.6.1	49,41
9.1.2.10	118,51	4.5.6.18	132,19
9.1.2.11	2,51	17.5.6.18	6,66
9.1.2.3	122,69	7.5.6.18	130,60
6.1.2.10	116,90	5.6.1.8	123,99
6.1.2.11	127,10	5.6.1.9	123,34
6.1.2.3	1,89	5.6.1.2	1,56
10.2.3.7	68,45	18.6.1.8	56,02
10.2.3.4	167,38	18.6.1.9	56,66
10.2.3.13	53,36	18.6.1.2	178,44
11.2.3.7	174,93	2.3.7.5.	91,47
11.2.3.4	76,01	2.3.7.12	156,70
11.2.3.13	63,26	2.3.7.16	23,40
1.2.3.7	50,86	13.3.7.5	146,19
1.2.3.4	48,06	13.3.7.12	34,36
1.2.3.13	172,68	13.3.7.16	98,94
2.3.4.14	157,47	4.3.7.5	22,38
7.3.4.14	94,32	4.3.7.12	89,45
13.3.4.14	21,92	4.3.7.16	137,26
2.3.4.15	30,53	6.5.7.3	88,36
7.3.4.15	138,74	6.5.7.12	158,94
13.3.4.15	105,02	6.5.7.16	26,98
2.3.4.5	85,80	17.5.7.3	148,94
7.3.4.5	22,41	17.5.7.12	36,24
13.3.4.5	138,65	17.5.7.16	95,72
15.4.5.17	95,27	4.5.7.3	22,38
15.4.5.7	144,51	4.5.7.12	90,32
15.4.5.6	38,84	4.5.7.16	137,73
14.4.5.17	28,60		
14.4.5.7	91,62		
14.4.5.6	162,71		
3.4.5.17	142,63		
3.4.5.7	22,41		
3.4.5.6	83,26		

nopinone

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-2

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

28 variables

fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	26,895
Wb . . .	68,332
Wd . . .	10,027
ΣW . . .	105,254

$\Delta\theta_{2.1.6}$	55"
ΔW	10^{-2} kcal

FIGURE : 135

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,277	0,846	0
3	0,953	2,346	0,055
4	- 0,112	2,830	- 0,960
5	- 1,086	2,333	0,135
6	- 1,259	0,834	0
7	- 0,022	2,506	1,249
8	- 0,005	- 0,643	0,917
9	- 0,031	- 0,720	- 0,857
10	1,867	0,590	0,917
11 Me	2,448	0,440	- 1,466
12	- 0,009	4,268	2,012
13	1,857	2,972	0,190
14	- 0,147	3,895	- 1,198
15	- 0,217	2,314	- 1,917
16	0,011	1,108	2,565
17	- 2,035	2,871	0,331
18	- 2,372	0,333	- 0,104

Angles (d°)			
2.1.6	112,97	17.5.4	120,50
1.2.3	111,29	17.5.6	113,49
2.3.4	115,28	18.6.5	121,06
i	2,04	12.7.3	113,36
i'	5,13	12.7.5	113,11
1.6.5	116,81	16.7.3	116,25
2.3.7	105,14	16.7.5	115,01
8.1.6	108,25	18.6.1	122,12
8.1.2	108,69	10.2.11	104,82
9.1.6	109,39	7.3.13	111,15
9.1.2	112,24	14.4.15	105,44
10.2.1	108,25	7.5.17	114,00
10.2.3	107,77	8.1.9	104,91
11.2.1	103,06	4.3.7	92,34
11.2.3	111,27	4.5.7	92,34
13.3.2	112,54	3.7.5	82,31
13.3.4	117,70	12.7.16	113,33
14.4.3	118,03	6.5.7	104,67
14.4.5	116,55	3.4.5	82,44
15.4.3	119,55	4.5.6	109,04
15.4.5	114,08		

Dièdres (d°)			
8.1.2.10	0,28	4.5.6.1	54,11
8.1.2.11	115,93	17.5.6.1	168,55
8.1.2.3	117,98	7.5.6.1	43,65
9.1.2.10	115,31	4.5.6.18	125,89
9.1.2.11	0,35	17.5.6.18	11,45
9.1.2.3	126,44	7.5.6.18	136,35
6.1.2.10	120,45	5.6.1.8	114,67
6.1.2.11	123,90	5.6.1.9	131,54
6.1.2.3	2,19	5.6.1.2	5,75
10.2.3.7	67,22	18.6.1.8	65,33
10.2.3.4	167,27	18.6.1.9	48,46
10.2.3.13	53,91	18.6.1.2	174,25
11.2.3.7	178,39	2.3.7.5.	92,71
11.2.3.4	78,34	2.3.7.12	155,38
11.2.3.13	60,48	2.3.7.16	21,44
1.2.3.7	51,32	13.3.7.5	145,25
1.2.3.4	48,73	13.3.7.12	33,34
1.2.3.13	172,45	13.3.7.16	100,60
2.3.4.14	160,23	4.3.7.5	24,28
7.3.4.14	91,81	4.3.7.12	87,63
13.3.4.14	23,61	4.3.7.16	138,42
2.3.4.15	29,79	6.5.7.3	86,09
7.3.4.15	137,75	6.5.7.12	161,73
13.3.4.15	106,83	6.5.7.16	29,34
2.3.4.5	83,66	17.5.7.3	149,33
7.3.4.5	24,31	17.5.7.12	37,15
13.3.4.5	139,72	17.5.7.16	95,24
15.4.5.17	96,87	4.5.7.3	24,28
15.4.5.7	143,36	4.5.7.12	87,90
15.4.5.6	36,97	4.5.7.16	139,71
14.4.5.17	26,45		
14.4.5.7	93,31		
14.4.5.6	160,03		
3.4.5.17	144,07		
3.4.5.7	24,31		
3.4.5.6	82,09		

verbanone

méthyl-4 diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-2

isomère trans

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

28 variables

fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	28,064
Wb . . .	68,835
Wd . . .	9,924
ΣW . . .	106,823

$\Delta\theta_{2.1.6}$	1'
ΔW	10^{-3} kcal

FIGURE : 136

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,295	0,818	0
3	0,937	2,305	- 0,144
4	- 0,121	2,638	- 1,223
5	- 1,110	2,310	- 0,078
6	- 1,277	0,806	0
7	- 0,050	2,636	1,005
8	0	- 0,654	0,909
9	- 0,024	- 0,719	- 0,859
10	1,837	0,666	0,969
11 Me	2,533	0,258	- 1,357
12	- 0,031	4,482	1,531
13	1,818	2,975	- 0,095
14	- 0,164	3,659	- 1,607
15	- 0,202	2,009	- 2,112
16	- 0,029	1,442	2,509
17	- 2,063	2,869	0
18	- 2,390	0,298	0,059

Angles (d°)			
2.1.6	115,45	17.5.4	119,63
1.2.3	108,63	17.5.6	113,74
2.3.4	115,68	18.6.5	120,99
i	5,38	12.7.3	113,74
i'	2,95	12.7.5	113,59
1.6.5	115,90	16.7.3	116,16
2.3.7	106,61	16.7.5	115,06
8.1.6	108,15	18.6.1	123,12
8.1.2	108,20	10.2.11	105,06
9.1.6	108,95	7.3.13	110,11
9.1.2	111,14	14.4.15	104,49
10.2.1	109,64	7.5.17	115,65
10.2.3	108,99	8.1.9	104,33
11.2.1	112,91	4.3.7	92,06
11.2.3	111,51	4.5.7	92,06
13.3.2	113,30	3.7.5	82,67
13.3.4	116,39	12.7.16	112,53
14.4.3	118,25	6.5.7	104,37
14.4.5	115,70	3.4.5	82,80
15.4.3	119,57	4.5.6	108,59
15.4.5	115,66		

Dièdres (d°)			
8.1.2.10	7,98	4.5.6.1	48,43
8.1.2.11	108,79	17.5.6.1	175,70
8.1.2.3	126,98	7.5.6.1	48,77
9.1.2.10	121,95	4.5.6.18	131,58
9.1.2.11	5,19	17.5.6.18	4,30
9.1.2.3	119,04	7.5.6.18	131,23
6.1.2.10	113,33	5.6.1.8	124,61
6.1.2.11	129,91	5.6.1.9	122,57
6.1.2.3	5,67	5.6.1.2	3,28
10.2.3.7	63,99	18.6.1.8	55,39
10.2.3.4	164,65	18.6.1.9	57,43
10.2.3.13	57,28	18.6.1.2	176,72
11.2.3.7	179,51	2.3.7.5.	93,50
11.2.3.4	79,83	2.3.7.12	153,90
11.2.3.13	58,24	2.3.7.16	20,87
1.2.3.7	55,43	13.3.7.5	143,22
1.2.3.4	45,23	13.3.7.12	30,62
1.2.3.13	176,70	13.3.7.16	102,41
2.3.4.14	159,21	4.3.7.5	24,09
7.3.4.14	91,24	4.3.7.12	88,50
13.3.4.14	22,45	4.3.7.16	138,46
2.3.4.15	30,05	6.5.7.3	85,69
7.3.4.15	139,60	6.5.7.12	161,55
13.3.4.15	106,70	6.5.7.16	29,81
2.3.4.5	85,44	17.5.7.3	148,57
7.3.4.5	24,12	17.5.7.12	35,82
13.3.4.5	137,81	17.5.7.16	95,92
15.4.5.17	95,21	4.5.7.3	24,09
15.4.5.7	143,54	4.5.7.12	88,66
15.4.5.6	37,63	4.5.7.16	139,60
14.4.5.17	27,42		
14.4.5.7	93,83		
14.4.5.6	160,26		
3.4.5.17	145,37		
3.4.5.7	24,12		
3.4.5.6	81,79		

verbanone

Méthyl-4, diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-2

isomère trans

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

28 variables

fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	30,029
Wb . . .	68,916
Wd . . .	9,958
ΣW . . .	108,903

$\Delta\theta_{2.1.6}$	26'
ΔW	0,5 kcal

FIGURE : 137

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,283	0,838	0
3	0,937	2,333	0,063
4	- 0,118	2,797	- 0,970
5	- 1,109	2,328	0,122
6	- 1,264	0,826	0
7	- 0,053	2,513	1,242
8	- 0,029	- 0,692	0,880
9	- 0,006	- 0,680	- 0,890
10 Me	2,515	0,335	1,384
11	1,860	0,621	- 0,935
12	- 0,039	4,283	1,986
13	1,831	2,976	0,184
14	- 0,144	3,865	- 1,200
15	- 0,200	2,277	- 1,927
16	- 0,068	1,156	2,601
17	- 2,063	2,867	0,283
18	- 2,376	0,320	- 0,094

isoverbanone

méthyl-4, diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-2

isomère cis

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

28 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	113,71	17.5.4	120,39
1.2.3	110,10	17.5.6	113,93
2.3.4	114,72	18.6.5	120,58
i	2,35	12.7.3	113,42
i'	4,64	12.7.5	113,27
1.6.5	117,13	16.7.3	117,46
2.3.7	106,75	16.7.5	114,92
8.1.6	108,43	18.6.1	122,30
8.1.2	111,06	10.2.11	102,73
9.1.6	109,10	7.3.13	111,39
9.1.2	109,65	14.4.15	106,23
10.2.1	113,24	7.5.17	115,08
10.2.3	111,69	8.1.9	104,45
11.2.1	109,00	4.3.7	92,17
11.2.3	109,80	4.5.7	92,17
13.3.2	112,83	3.7.5	82,61
13.3.4	116,64	12.7.16	112,16
14.4.3	116,72	6.5.7	104,30
14.4.5	115,47	3.4.5	82,74
15.4.3	119,52	4.5.6	108,04
15.4.5	115,22		

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	31,571
Wb . . .	67,986
Wd . . .	9,867
ΣW . . .	109,425

$\Delta\theta_{2.1.6}$	50"
ΔW	$3\ 10^{-3}$ kcal

Dièdres (d°)			
8.1.2.10	5,72	4.5.6.1	52,85
8.1.2.11	119,38	17.5.6.1	170,56
8.1.2.3	120,12	7.5.6.1	44,28
9.1.2.10	109,22	4.5.6.18	127,15
9.1.2.11	4,45	17.5.6.18	9,44
9.1.2.3	124,94	7.5.6.18	135,72
6.1.2.10	128,34	5.6.1.8	118,85
6.1.2.11	117,99	5.6.1.9	127,95
6.1.2.3	2,50	5.6.1.2	5,21
10.2.3.7	76,05	18.6.1.8	61,15
10.2.3.4	176,55	18.6.1.9	52,05
10.2.3.13	46,63	18.6.1.2	174,79
11.2.3.7	170,66	2.3.7.5.	92,68
11.2.3.4	70,17	2.3.7.12	155,11
11.2.3.13	66,65	2.3.7.16	21,62
1.2.3.7	50,65	13.3.7.5	143,75
1.2.3.4	49,84	13.3.7.12	31,54
1.2.3.13	173,34	13.3.7.16	101,96
2.3.4.14	159,52	4.3.7.5	23,97
7.3.4.14	90,92	4.3.7.12	88,24
13.3.4.14	24,38	4.3.7.16	138,26
2.3.4.15	29,36	6.5.7.3	85,27
7.3.4.15	138,93	6.5.7.12	162,36
13.3.4.15	105,77	6.5.7.16	31,63
2.3.4.5	85,57	17.5.7.3	149,18
7.3.4.5	23,99	17.5.7.12	36,81
13.3.4.5	139,29	17.5.7.16	93,92
15.4.5.17	95,79	4.5.7.3	23,97
15.4.5.7	143,28	4.5.7.12	88,40
15.4.5.6	37,48	4.5.7.16	140,87
14.4.5.17	28,73		
14.4.5.7	92,20		
14.4.5.6	161,99		
3.4.5.17	144,93		
3.4.5.7	23,99		
3.4.5.6	81,81		

FIGURE : 138

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,286	0,833	0
3	0,947	2,330	- 0,044
4	- 0,074	2,746	- 1,131
5	- 1,083	2,324	- 0,036
6	- 1,267	0,821	0
7	- 0,064	2,593	1,101
8	- 0,019	- 0,687	0,885
9	- 0,004	- 0,692	- 0,881
10 Me	2,470	0,407	1,450
11	1,906	0,559	- 0,892
12	- 0,062	4,410	1,721
13	1,842	2,977	0,047
14	- 0,041	3,794	- 1,437
15	- 0,124	2,170	- 2,058
16	- 0,122	1,331	2,547
17	- 2,032	2,889	0,051
18	- 2,389	0,328	0,027

isoverbanone

méthyl-4, diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-2

isomère cis

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

28 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	114,15	17.5.4	118,35
1.2.3	110,16	17.5.6	113,54
2.3.4	115,31	18.6.5	120,72
i	1,65	12.7.3	113,49
i'	1,35	12.7.5	113,71
1.6.5	115,92	16.7.3	117,68
2.3.7	106,75	16.7.5	114,71
8.1.6	108,59	18.6.1	123,36
8.1.2	110,35	10.2.11	101,88
9.1.6	109,46	7.3.13	111,51
9.1.2	109,80	14.4.15	105,61
10.2.1	113,40	7.5.17	114,68
10.2.3	111,96	8.1.9	104,01
11.2.1	109,37	4.3.7	92,46
11.2.3	109,74	4.5.7	92,46
13.3.2	112,85	3.7.5	81,81
13.3.4	115,73	12.7.16	112,25
14.4.3	115,76	6.5.7	103,61
14.4.5	118,68	3.4.5	81,94
15.4.3	118,97	4.5.6	111,50
15.4.5	115,27		

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	31,657
Wb . . .	69,572
Wd . . .	9,849
ΣW . . .	111,078

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2'
ΔW	$2\ 10^{-2}$ kcal

Dièdres (d°)			
8.1.2.10	2,00	4.5.6.1	48,07
8.1.2.11	114,94	17.5.6.1	175,19
8.1.2.3	124,36	7.5.6.1	50,14
9.1.2.10	112,07	4.5.6.18	131,93
9.1.2.11	0,87	17.5.6.18	4,81
9.1.2.3	121,57	7.5.6.18	129,86
6.1.2.10	124,61	5.6.1.8	125,06
6.1.2.11	122,45	5.6.1.9	122,02
6.1.2.3	1,75	5.6.1.2	1,49
10.2.3.7	75,26	18.6.1.8	54,95
10.2.3.4	176,33	18.6.1.9	57,98
10.2.3.13	47,59	18.6.1.2	178,51
11.2.3.7	172,39	2.3.7.5.	92,28
11.2.3.4	71,32	2.3.7.12	155,35
11.2.3.13	64,77	2.3.7.16	21,38
1.2.3.7	51,91	13.3.7.5	144,04
1.2.3.4	49,16	13.3.7.12	31,67
1.2.3.13	174,75	13.3.7.16	102,30
2.3.4.14	157,26	4.3.7.5	25,09
7.3.4.14	92,90	4.3.7.12	87,27
13.3.4.14	22,44	4.3.7.16	138,76
2.3.4.15	29,76	6.5.7.3	87,73
7.3.4.15	139,61	6.5.7.12	160,14
13.3.4.15	105,05	6.5.7.16	29,04
2.3.4.5	84,72	17.5.7.3	147,97
7.3.4.5	25,12	17.5.7.12	35,84
13.3.4.5	140,47	17.5.7.16	95,25
15.4.5.17	96,70	4.5.7.3	25,09
15.4.5.7	143,42	4.5.7.12	87,03
15.4.5.6	37,75	4.5.7.16	141,87
14.4.5.17	29,98		
14.4.5.7	89,90		
14.4.5.6	164,43		
3.4.5.17	145,00		
3.4.5.7	25,12		
3.4.5.6	80,55		

FIGURE : 139

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	- 1,300	0,769	0
3	1,027	2,277	0,104
4	0,007	2,601	- 1,015
5	- 1,049	2,282	0,071
6	- 1,300	0,769	0
7	- 0,027	2,631	1,183
8	1,964	0,421	0,832
9	1,852	0,556	- 0,951
10	- 0,001	- 1,225	0
11	1,936	2,909	0,080
12	- 0,029	4,491	1,659
13	0,006	1,914	- 1,864
14	0,013	3,646	- 1,332
15	- 1,967	2,902	0,035
16	- 0,037	1,552	2,771
17	- 1,859	0,534	- 0,942
18	- 1,960	0,438	0,842

isonopinone

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1)

Heptanone-3

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

28 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	118,81	17.6.5	110,63
1.2.3	110,29	17.6.1	110,90
2.3.4	105,90	10.1.6	120,57
i	3,87	12.7.3	113,26
i'	2,66	12.7.5	113,28
1.6.5	111,18	16.7.3	116,79
2.3.7	113,10	16.7.5	117,63
8.2.1	110,65	10.1.2	120,62
8.2.3	111,08	8.2.9	106,22
9.2.1	109,13	11.3.7	116,26
9.2.3	109,37	14.4.13	112,09
11.3.2	114,42	15.5.7	116,36
11.3.4	113,94	18.6.17	106,03
13.4.3	115,52	4.3.7	90,41
13.4.5	114,56	4.5.7	90,41
14.4.3	113,97	3.7.5	84,11
14.4.5	113,84	12.7.16	109,84
15.5.4	115,27	6.5.7	111,25
15.5.6	114,50	3.4.5	84,24
18.6.5	109,06	4.5.6	106,35
18.6.1	108,88		

Energie (kcal/mole)	
Wa	8,668
Wb	63,424
Wd	7,940
Wdp . . .	
ΣW	80,032
W_L	
$\Sigma W+W_L$	

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	4,12	4.5.6.1	49,23
6.1.2.8	127,43	4.5.6.17	70,84
6.1.2.9	116,04	4.5.6.18	172,92
10.1.2.3	175,88	15.5.6.1	177,74
10.1.2.8	52,57	15.5.6.17	57,67
10.1.2.9	63,96	15.5.6.18	58,58
1.2.3.11	178,33	7.5.6.1	47,78
1.2.3.4	51,98	7.5.6.17	167,85
1.2.3.7	45,46	7.5.6.18	75,91
8.2.3.11	58,61	2.3.7.5	82,98
8.2.3.4	175,04	2.3.7.12	164,18
8.2.3.7	77,60	2.3.7.16	35,07
9.2.3.11	58,31	11.3.7.5	141,66
9.2.3.4	68,04	11.3.7.12	28,82
9.2.3.7	165,48	11.3.7.16	100,29
2.3.4.13	24,86	4.3.7.5	24,53
2.3.4.14	156,79	4.3.7.12	88,31
2.3.4.5	89,65	4.3.7.16	142,58
11.3.4.13	101,77	3.7.5.15	143,22
11.3.4.14	30,16	3.7.5.4	24,53
11.3.4.5	143,72	3.7.5.6	83,22
7.3.4.13	139,06	12.7.5.15	30,40
7.3.4.14	89,01	12.7.5.4	88,29
7.3.4.5	24,55	12.7.5.6	163,96
3.4.5.15	144,19	16.7.5.15	99,56
3.4.5.6	87,76	16.7.5.4	141,75
3.4.5.7	24,55	16.7.5.6	34,01
13.4.5.15	100,34	5.6.1.2	2,84
13.4.5.6	27,71	17.6.1.2	117,33
13.4.5.7	140,03	18.6.1.2	126,38
14.4.5.15	30,50	5.6.1.10	177,16
14.4.5.6	158,54	17.6.1.10	62,67
14.4.5.7	89,14	18.6.1.10	53,62

FIGURE : 140

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,303	0,763	0
3	1,030	2,273	- 0,074
4	- 0,034	2,408	- 1,190
5	- 1,065	2,280	- 0,043
6	- 1,303	0,763	0
7	0	2,753	0,979
8	1,932	0,511	0,892
9	1,910	0,452	- 0,888
10	0,016	- 1,225	0
11	1,918	2,915	- 0,240
12	0,013	4,652	1,268
13	- 0,061	1,580	- 1,902
14	- 0,033	3,387	- 1,674
15	- 1,986	2,890	- 0,141
16	- 0,009	1,860	2,679
17	- 1,918	0,451	- 0,882
18	- 1,896	0,504	0,914

isonopinone

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1)

heptanone-3

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

28 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	119,26	17.6.5	109,48
1.2.3	110,12	17.6.1	109,88
2.3.4	104,01	10.1.6	121,14
i	2,77	12.7.3	113,81
i'	1,61	12.7.5	113,94
1.6.5	111,47	16.7.3	117,42
2.3.7	112,93	16.7.5	116,02
8.2.1	111,76	10.1.2	119,60
8.2.3	111,07	8.2.9	105,32
9.2.1	109,10	11.3.7	117,07
9.2.3	109,34	14.4.13	112,99
11.3.2	115,77	15.5.7	117,46
11.3.4	113,10	18.6.17	106,68
13.4.3	114,94	4.3.7	90,34
13.4.5	113,84	4.5.7	90,34
14.4.3	113,39	3.7.5	85,08
14.4.5	113,74	12.7.16	109,06
15.5.4	116,27	6.5.7	112,89
15.5.6	114,66	3.4.5	85,21
18.6.5	109,79	4.5.6	101,83
18.6.1	109,44		

Energie (kcal/mole)	
Wa	8,717
Wb	64,276
Wd	8,470
Wdp . . .	
ΣW	81,463
W_L	
$\Sigma W+W_L$	

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,01 kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	2,95	4.5.6.1	48,10
6.1.2.8	121,00	4.5.6.17	73,34
6.1.2.9	122,95	4.5.6.18	169,87
10.1.2.3	177,05	15.5.6.1	174,52
10.1.2.8	59,00	15.5.6.17	53,09
10.1.2.9	57,05	15.5.6.18	63,70
1.2.3.11	170,75	7.5.6.1	47,36
1.2.3.4	46,03	7.5.6.17	168,79
1.2.3.7	50,41	7.5.6.18	74,42
8.2.3.11	64,90	2.3.7.5	82,94
8.2.3.4	170,38	2.3.7.12	163,03
8.2.3.7	73,94	2.3.7.16	33,89
9.2.3.11	50,89	11.3.7.5	138,79
9.2.3.4	73,82	11.3.7.12	24,76
9.2.3.7	170,27	11.3.7.16	104,38
2.3.4.13	22,80	4.3.7.5	22,45
2.3.4.14	154,89	4.3.7.12	91,58
2.3.4.5	91,30	4.3.7.16	139,28
11.3.4.13	103,61	3.7.5.15	142,58
11.3.4.14	28,48	3.7.5.4	22,45
11.3.4.5	142,30	3.7.5.6	80,55
7.3.4.13	136,57	12.7.5.15	28,68
7.3.4.14	91,34	12.7.5.4	91,45
7.3.4.5	22,47	12.7.5.6	165,55
3.4.5.15	143,61	16.7.5.15	99,24
3.4.5.6	91,02	16.7.5.4	140,64
3.4.5.7	22,47	16.7.5.6	37,63
13.4.5.15	101,20	5.6.1.2	1,73
13.4.5.6	24,16	17.6.1.2	123,37
13.4.5.7	137,66	18.6.1.2	119,81
14.4.5.15	30,15	5.6.1.10	178,28
14.4.5.6	155,51	17.6.1.10	56,63
14.4.5.7	90,99	18.6.1.10	60,19

FIGURE : 141

Atomes	coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,295	0,773	0
3	1,047	2,215	0,480
4	0	2,813	- 0,494
5	- 1,047	2,215	0,480
6	- 1,295	0,773	0
7	0	2,231	1,620
8	0	3,905	- 0,504
9	0	2,386	- 1,499
10	2,050	0,274	0,656
11	1,707	0,804	- 1,041
12	1,993	2,771	0,633
13	- 1,993	2,771	0,633
14	0	3,877	2,609
15	0	0,747	2,838
16	- 2,050	0,274	0,656
17	- 1,707	0,804	- 1,041
18	0	- 1,225	0

isonopinone

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

12 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
6.1.2	118,04
1.2.3	110,11
2.3.4	105,86
3.4.5	84,99
10.2.1	110,27
11.2.1	109,14
12.2.4	118,06
8.4.3	113,01
9.4.3	115,34
14.7.3	112,85
15.7.3	117,34
2.3.7	110,42
4.3.7	90,11
3.7.5	85,13
10.2.11	107,86
2.3.12	112,05
8.4.9	112,50
14.7.15	109,61
18.1.2	120,98

Energie (kcal/mole	
Wa . .	11,301
Wb . .	61,459
Wd . .	7,724
Wdp. .	
ΣW . .	80,484
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	38,65
18.1.2.3	160,56
18.1.2.11	79,66
6.1.2.10	141,35
6.1.2.3	19,44
6.1.2.11	100,34
10.2.3.7	84,01
10.2.3.4	179,82
10.2.3.12	49,80
1.2.3.7	37,89
1.2.3.4	58,30
1.2.3.12	171,71
11.2.3.7	157,68
11.2.3.4	61,48
11.2.3.12	68,51
12.3.4.8	32,58
12.3.4.5	145,48
12.3.4.9	98,80
7.3.4.8	89,71
7.3.4.5	23,20
7.3.4.9	138,91
2.3.4.8	158,99
2.3.4.5	88,11
2.3.4.9	27,61
4.3.7.14	89,55
4.3.7.15	141,57
4.3.7.5	23,22
12.3.7.14	32,74
12.3.7.15	96,15
12.3.7.5	145,51
2.3.7.14	163,46
2.3.7.15	34,57
2.3.7.5	83,77

FIGURE : 142

Atomes	coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,292	0,781	0
3	1,043	2,189	- 0,561
4	0	2,003	- 1,693
5	- 1,043	2,189	- 0,561
6	- 1,292	0,781	0
7	0	2,971	0,274
8	0	1,008	- 2,142
9	0	2,805	- 2,435
10	1,759	0,815	1,017
11	2,012	0,260	- 0,681
12	1,989	2,706	- 0,815
13	- 1,989	2,706	- 0,815
14	0	4,851	- 0,120
15	0	2,737	2,180
16	- 1,759	0,815	1,017
17	- 2,012	0,260	- 0,681
18	0	- 1,225	0

isonopinone

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

12 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
6.1.2	117,66
1.2.3	109,59
2.3.4	105,44
3.4.5	84,53
10.2.1	111,87
11.2.1	108,00
12.2.4	117,61
8.4.3	114,17
9.4.3	114,09
14.7.3	112,56
15.7.3	118,28
2.3.7	112,04
4.3.7	90,10
3.7.5	84,67
10.2.11	107,34
2.3.12	111,84
8.4.9	112,93
14.7.15	108,87
18.1.2	121,17

Energie (kcal/mole	
Wa . .	12,006
Wb . .	63,508
Wd . .	7,595
Wdp. .	
ΣW . .	83,110
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	78,16
18.1.2.3	157,17
18.1.2.11	39,75
6.1.2.10	101,84
6.1.2.3	22,83
6.1.2.11	140,25
10.2.3.7	64,97
10.2.3.4	161,50
10.2.3.12	69,54
1.2.3.7	59,70
1.2.3.4	36,83
1.2.3.12	165,79
11.2.3.7	177,12
11.2.3.4	80,59
11.2.3.12	48,37
12.3.4.8	100,05
12.3.4.5	145,88
12.3.4.9	31,90
7.3.4.8	138,34
7.3.4.5	24,28
7.3.4.9	89,70
2.3.4.8	25,40
2.3.4.5	88,67
2.3.4.9	157,36
4.3.7.14	87,94
4.3.7.15	143,65
4.3.7.5	24,31
12.3.7.14	33,66
12.3.7.15	94,75
12.3.7.5	145,91
2.3.7.14	165,32
2.3.7.15	36,92
2.3.7.5	82,43

FIGURE : 143

Atomes	coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,298	0,771	0
3	1,046	2,214	0,463
4	0	2,809	- 0,514
5	- 1,046	2,214	0,463
6	- 1,298	0,771	0
7	0	2,267	1,603
8	0	3,901	- 0,517
9	0	2,387	- 1,521
10	2,049	0,273	0,665
11	1,720	0,784	- 1,038
12	1,984	2,784	0,609
13	- 1,984	2,784	0,609
14	0	3,936	2,553
15	0	0,812	2,856
16	- 2,049	0,273	0,665
17	- 1,720	0,784	- 1,038
18	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
6.1.2	118,60
1.2.3	109,76
2.3.4	106,37
3.4.5	84,86
10.2.1	110,43
11.2.1	109,25
12.2.4	117,18
8.4.3	112,70
9.4.3	115,64
14.7.3	113,23
15.7.3	117,02
2.3.7	111,44
4.3.7	89,72
3.7.5	85,00
10.2.11	107,68
2.3.12	112,61
8.4.9	112,57
14.7.15	109,62
18.1.2	120,70

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	39,35
18.1.2.3	161,33
18.1.2.11	78,90
6.1.2.10	140,65
6.1.2.3	18,67
6.1.2.11	101,10
10.2.3.7	83,61
10.2.3.4	180,00
10.2.3.12	50,43
1.2.3.7	38,37
1.2.3.4	57,94
1.2.3.12	172,41
11.2.3.7	158,14
11.2.3.4	61,83
11.2.3.12	67,82
12.3.4.8	32,63
12.3.4.5	145,11
12.3.4.9	98,86
7.3.4.8	88,10
7.3.4.5	24,38
7.3.4.9	140,42
2.3.4.8	159,60
2.3.4.5	87,92
2.3.4.9	28,11
4.3.7.14	88,75
4.3.7.15	142,27
4.3.7.5	24,41
12.3.7.14	31,98
12.3.7.15	97,00
12.3.7.5	145,14
2.3.7.14	163,74
2.3.7.15	34,76
2.3.7.5	83,10

Energie (kcal/mole	
Wa . .	9,673
Wb . .	60,008
Wd . .	7,609
Wdp. .	
ΣW . .	79,291
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.6}$	1"
ΔW	10^{-5} kcal

FIGURE : 144

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3 (isonopinone)

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

12 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

fonctions : C---Me, H---Me, CO---H, CO---C, CO---Me du tableau 8

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,279	0,803	0
3	0,995	2,299	0,200
4	0	2,456	- 0,976
5	- 0,995	2,299	0,200
6	- 1,279	0,803	0
7	0	2,485	1,117
8	0	3,376	- 1,563
9	0	1,664	- 1,729
10	2,026	0,411	0,737
11	1,870	0,624	- 0,935
12	2,006	2,732	0,065
13	- 2,006	2,732	0,065
14	0	4,144	2,083
15	0	1,235	2,555
16	- 2,026	0,411	0,737
17	- 1,870	0,624	- 0,935
18	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	115,77
1.2.3	111,17
2.3.4	96,82
3.4.5	79,97
10.2.1	112,26
11.2.1	111,20
12.3.4	117,02
8.4.3	119,58
9.4.3	116,75
14.7.3	108,13
15.7.3	115,27
2.3.7	108,19
14.7.15	101,20
8.4.9	103,56
18.1.2	122,11

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	45,30
18.1.2.11	63,52
10.2.3.12	59,09
11.2.3.12	49,72
10.2.3.7	87,16
10.2.3.4	178,39
1.2.3.7	39,53
1.2.3.4	54,83
1.2.3.12	174,17
11.2.3.7	164,02
11.2.3.4	69,67
12.3.4.14	36,93
12.3.4.15	89,62

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	10,363
Wb . .	63,673
Wd . .	9,650
ΣW . .	83,686

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

12 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

Me---H, CO---H, CO---C, CO---Me du tableau 8

C---Me = $0,11e^{3,76(3,85-r)}$

FIGURE : 145

Atomes	coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,296	0,775	0
3	1,048	2,183	- 0,560
4	0	2,021	- 1,691
5	- 1,048	2,183	- 0,560
6	- 1,296	0,775	0
7	0	2,951	0,282
8	0	1,023	- 2,135
9	0	2,810	- 2,446
10	1,751	0,814	1,023
11	2,037	0,247	- 0,653
12	1,970	2,738	- 0,821
13	- 1,970	2,738	- 0,821
14	0	4,842	- 0,050
15	0	2,641	2,177
16	- 1,751	0,814	1,023
17	- 2,037	0,247	- 0,653
18	0	- 1,225	0

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1)
heptanone-3 (isonopinone)

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

12 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geqslant 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

fonctions : C---Me, H---Me, CO---H, CO---C, CO---Me
du tableau 8

Angles (d°)	
6.1.2	118,28
1.2.3	109,36
2.3.4	106,22
3.4.5	85,05
10.2.1	111,49
11.2.1	109,05
12.2.4	116,32
8.4.3	113,11
9.4.3	115,39
14.7.3	113,21
15.7.3	117,19
2.3.7	111,47
4.3.7	89,50
3.7.5	85,19
10.2.11	106,31
2.3.12	114,24
8.4.9	112,26
14.7.15	109,26
18.1.2	120,86

Energie (kcal/mole	
Wa . .	12,251
Wb . .	62,585
Wd . .	7,999
Wdp. .	
ΣW . .	82,835
W_L . .	
$\Sigma W + W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	10^{-3} kcal

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	78,97
18.1.2.3	157,28
18.1.2.11	38,12
6.1.2.10	101,03
6.1.2.3	22,72
6.1.2.11	141,89
10.2.3.7	64,44
10.2.3.4	160,44
10.2.3.12	69,96
1.2.3.7	59,32
1.2.3.4	36,69
1.2.3.12	166,28
11.2.3.7	178,49
11.2.3.4	82,48
11.2.3.12	47,12
12.3.4.8	103,16
12.3.4.5	143,80
12.3.4.9	28,01
7.3.4.8	137,47
7.3.4.5	24,43
7.3.4.9	91,36
2.3.4.8	25,22
2.3.4.5	87,82
2.3.4.9	156,39
4.3.7.14	88,76
4.3.7.15	142,65
4.3.7.5	24,46
12.3.7.14	30,61
12.3.7.15	97,99
12.3.7.5	143,83
2.3.7.14	163,98
2.3.7.15	35,39
2.3.7.5	82,80

FIGURE : 146

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,301	0,767	0
3	1,036	2,277	0,096
4	0,021	2,545	- 1,042
5	- 1,047	2,281	0,047
6	- 1,301	0,767	0
7	- 0,030	2,663	1,152
8 Me	2,467	0,171	1,405
9	1,842	0,553	- 0,957
10	0,008	- 1,225	0
11	1,935	2,921	0,034
12	- 0,031	4,533	1,587
13	0,034	1,823	- 1,861
14	0,032	3,576	- 1,402
15	- 1,962	2,904	- 0,003
16	- 0,081	1,632	2,771
17	- 1,886	0,508	- 0,919
18	- 1,935	0,456	0,870

isopinocamphone

triméthyl-2,6,6 bicyclo (3.1.1)

heptanone-3

isomère cis

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

28 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	118,98	17.6.5	110,07
1.2.3	110,52	17.6.1	110,29
2.3.4	103,77	10.1.6	120,90
i	3,57	12.7.3	113,42
i'	1,75	12.7.5	113,68
1.6.5	110,99	16.7.3	117,30
2.3.7	113,97	16.7.5	116,82
8.2.1	111,45	10.1.2	120,12
8.2.3	111,33	8.2.9	105,84
9.2.1	108,63	11.3.7	116,81
9.2.3	108,89	14.4.13	112,12
11.3.2	115,38	15.5.7	115,80
11.3.4	112,95	18.6.17	106,14
13.4.3	115,36	4.3.7	90,36
13.4.5	114,98	4.5.7	90,36
14.4.3	113,59	3.7.5	84,48
14.4.5	113,61	12.7.16	109,42
15.5.4	116,24	6.5.7	111,92
15.5.6	114,61	3.4.5	84,62
18.6.5	109,83	4.5.6	105,14
18.6.1	109,41		

Energie (kcal/mole)	
Wa	10,518
Wb	64,186
Wd	8,128
Wdp . . .	
ΣW	82,831
W_L	
$\Sigma W+W_L$	

$\Delta\theta_{2.1.6}$	1"
ΔW	10^{-3} kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	3,81	4.5.6.1	48,15
6.1.2.8	128,18	4.5.6.17	72,96
6.1.2.9	115,60	4.5.6.18	170,53
10.1.2.3	176,19	15.5.6.1	177,04
10.1.2.8	51,82	15.5.6.17	55,92
10.1.2.9	64,40	15.5.6.18	60,58
1.2.3.11	176,09	7.5.6.1	48,51
1.2.3.4	51,99	7.5.6.17	169,63
1.2.3.7	44,68	7.5.6.18	73,87
8.2.3.11	59,48	2.3.7.5	81,48
8.2.3.4	176,42	2.3.7.12	165,08
8.2.3.7	79,75	2.3.7.16	35,93
9.2.3.11	56,84	11.3.7.5	139,91
9.2.3.4	67,26	11.3.7.12	26,46
9.2.3.7	163,93	11.3.7.16	102,69
2.3.4.13	24,12	4.3.7.5	23,79
2.3.4.14	155,55	4.3.7.12	89,65
2.3.4.5	91,01	4.3.7.16	141,20
11.3.4.13	101,54	3.7.5.15	143,41
11.3.4.14	29,88	3.7.5.4	23,79
11.3.4.5	143,33	3.7.5.6	82,71
7.3.4.13	138,95	12.7.5.15	30,23
7.3.4.14	89,62	12.7.5.4	89,39
7.3.4.5	23,82	12.7.5.6	164,11
3.4.5.15	143,05	16.7.5.15	98,72
3.4.5.6	89,04	16.7.5.4	141,67
3.4.5.7	23,82	16.7.5.6	35,16
13.4.5.15	101,43	5.6.1.2	1,86
13.4.5.6	26,47	17.6.1.2	119,49
13.4.5.7	139,33	18.6.1.2	124,12
14.4.5.15	29,63	5.6.1.10	178,14
14.4.5.6	157,54	17.6.1.10	60,51
14.4.5.7	89,60	18.6.1.10	55,88

FIGURE : 147

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,301	0,766	0
3	1,022	2,273	- 0,093
4	- 0,042	2,425	- 1,207
5	- 1,065	2,283	- 0,054
6	- 1,301	0,766	0
7	0	2,768	0,963
8 Me	2,373	0,352	1,538
9	1,911	0,449	- 0,884
10	0,015	- 1,225	0
11	1,908	2,920	0,250
12	0,017	4,669	1,230
13	- 0,070	1,606	- 1,929
14	- 0,046	3,411	- 1,677
15	- 1,987	2,892	- 0,138
16	- 0,003	1,887	2,669
17	- 1,921	0,447	- 0,877
18	- 1,892	0,512	0,917

isopinocamphone

triméthyl-2,6,6 bicyclo (3.1.1)

heptanone-3

isomère cis

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

28 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	119,05	17.6.5	109,47
1.2.3	109,93	17.6.1	109,86
2.3.4	105,36	10.1.6	121,18
i	3,48	12.7.3	113,88
i'	2,00	12.7.5	114,03
1.6.5	111,60	16.7.3	117,40
2.3.7	113,05	16.7.5	115,98
8.2.1	111,82	10.1.2	119,77
8.2.3	111,22	8.2.9	105,51
9.2.1	109,01	11.3.7	115,94
9.2.3	109,22	14.4.13	113,12
11.3.2	115,81	15.5.7	116,70
11.3.4	113,03	18.6.17	106,55
13.4.3	114,79	4.3.7	90,34
13.4.5	114,04	4.5.7	90,34
14.4.3	113,57	3.7.5	84,64
14.4.5	113,68	12.7.16	109,28
15.5.4	116,26	6.5.7	113,08
15.5.6	114,67	3.4.5	84,77
18.6.5	109,81	4.5.6	102,62
18.6.1	109,43		

Energie (kcal/mole)	
Wa	11,079
Wb	64,249
Wd	8,294
Wdp . . .	
ΣW	83,623
W_L	
$\Sigma W+W_L$	

$\Delta\theta_{2.1.6}$	1'
ΔW	10^{-3} kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	3,702	4.5.6.1	48,35
6.1.2.8	120,35	4.5.6.17	73,17
6.1.2.9	123,39	4.5.6.18	170,19
10.1.2.3	176,30	15.5.6.1	175,35
10.1.2.8	59,65	15.5.6.17	53,82
10.1.2.9	56,61	15.5.6.18	62,82
1.2.3.11	171,39	7.5.6.1	47,50
1.2.3.4	45,69	7.5.6.17	169,02
1.2.3.7	51,40	7.5.6.18	74,34
8.2.3.11	64,21	2.3.7.5	83,38
8.2.3.4	170,09	2.3.7.12	162,68
8.2.3.7	72,99	2.3.7.16	33,17
9.2.3.11	51,84	11.3.7.5	139,47
9.2.3.4	73,86	11.3.7.12	25,53
9.2.3.7	170,96	11.3.7.16	103,98
2.3.4.13	23,56	4.3.7.5	23,50
2.3.4.14	155,89	4.3.7.12	90,44
2.3.4.5	90,53	4.3.7.16	140,05
11.3.4.13	103,84	3.7.5.15	143,38
11.3.4.14	28,49	3.7.5.4	23,50
11.3.4.5	142,07	3.7.5.6	80,38
7.3.4.13	137,62	12.7.5.15	29,59
7.3.4.14	90,05	12.7.5.4	90,29
7.3.4.5	23,53	12.7.5.6	165,82
3.4.5.15	143,79	16.7.5.15	98,68
3.4.5.6	90,24	16.7.5.4	141,44
3.4.5.7	23,53	16.7.5.6	37,55
13.4.5.15	101,36	5.6.1.2	2,14
13.4.5.6	24,61	17.6.1.2	123,89
13.4.5.7	138,37	18.6.1.2	119,46
14.4.5.15	30,32	5.6.1.10	177,86
14.4.5.6	156,29	17.6.1.10	56,11
14.4.5.7	89,95	18.6.1.10	60,54

FIGURE : 148

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,311	0,749	0
3	1,019	2,257	0,045
4	- 0,042	2,578	- 1,036
5	- 1,074	2,265	0,074
6	- 1,311	0,749	0
7	- 0,011	2,616	1,146
8	1,934	0,451	0,881
9 Me	2,364	0,267	- 1,531
10	0,0163	- 1,225	0
11	1,911	2,911	- 0,008
12	0	4,472	1,636
13	- 0,081	1,922	- 1,908
14	- 0,036	3,625	- 1,347
15	- 1,998	2,877	0,062
16	- 0,0075	1,450	2,743
17	- 1,880	0,503	- 0,933
18	- 1,948	0,418	0,859

pinocamphone

triméthyl-2,6,6 bicyclo (3.1.1)

heptanone-3

isomère trans

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

28 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	120,50	17.6.5	110,06
1.2.3	108,76	17.6.1	110,29
2.3.4	108,30	10.1.6	120,51
i	1,68	12.7.3	113,67
i'	2,75	12.7.5	113,55
1.6.5	110,85	16.7.3	117,44
2.3.7	112,00	16.7.5	116,82
8.2.1	110,56	10.1.2	118,99
8.2.3	110,12	8.2.9	104,81
9.2.1	110,58	11.3.7	115,63
9.2.3	111,97	14.4.13	110,44
11.3.2	115,12	15.5.7	116,99
11.3.4	113,32	18.6.17	106,57
13.4.3	117,21	4.3.7	89,58
13.4.5	115,27	4.5.7	89,58
14.4.3	113,24	3.7.5	84,94
14.4.5	113,66	12.7.16	108,92
15.5.4	115,93	6.5.7	111,23
15.5.6	114,57	3.4.5	85,08
18.6.5	109,60	4.5.6	105,55
18.6.1	109,37		

Energie (kcal/mole)	
Wa	11,434
Wb	64,290
Wd	7,925
Wdp . . .	
ΣW	83,648
W_L	
$\Sigma W+W_L$	

$\Delta\theta_{2.1.6}$	1'
ΔW	$3\ 10^{-2}$ kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	1,77	4.5.6.1	50,37
6.1.2.8	122,80	4.5.6.17	70,44
6.1.2.9	121,57	4.5.6.18	172,66
10.1.2.3	178,24	15.5.6.1	179,16
10.1.2.8	57,20	15.5.6.17	58,33
10.1.2.9	58,43	15.5.6.18	58,56
1.2.3.11	176,76	7.5.6.1	45,37
1.2.3.4	48,77	7.5.6.17	166,19
1.2.3.7	48,43	7.5.6.18	76,92
8.2.3.11	61,94	2.3.7.5	85,11
8.2.3.4	170,08	2.3.7.12	161,36
8.2.3.7	72,87	2.3.7.16	32,56
9.2.3.11	54,26	11.3.7.5	140,33
9.2.3.4	73,73	11.3.7.12	26,80
9.2.3.7	170,94	11.3.7.16	102,00
2.3.4.13	27,38	4.3.7.5	24,50
2.3.4.14	157,78	4.3.7.12	89,02
2.3.4.5	88,56	4.3.7.16	142,17
11.3.4.13	101,62	3.7.5.15	143,65
11.3.4.14	28,77	3.7.5.4	24,50
11.3.4.5	142,43	3.7.5.6	82,05
7.3.4.13	140,48	12.7.5.15	30,00
7.3.4.14	89,13	12.7.5.4	89,14
7.3.4.5	24,53	12.7.5.6	164,31
3.4.5.15	144,61	16.7.5.15	98,08
3.4.5.6	87,43	16.7.5.4	142,77
3.4.5.7	24,53	16.7.5.6	36,22
13.4.5.15	97,56	5.6.1.2	2,94
13.4.5.6	30,40	17.6.1.2	118,01
13.4.5.7	142,36	18.6.1.2	125,10
14.4.5.15	31,37	5.6.1.10	177,06
14.4.5.6	159,33	17.6.1.10	61,99
14.4.5.7	88,71	18.6.1.10	54,90

FIGURE : 149

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,301	0,767	0
3	1,022	2,273	- 0,114
4	- 0,066	2,390	- 1,209
5	- 1,057	2,283	- 0,024
6	- 1,301	0,767	0
7	0,030	2,795	0,956
8	1,918	0,539	0,906
9 Me	2,365	0,201	- 1,495
10	0,016	- 1,225	0
11	1,904	2,914	- 0,310
12	0,051	4,702	1,175
13	- 0,121	1,557	- 1,913
14	- 0,080	3,362	- 1,708
15	- 1,976	2,898	- 0,096
16	0,068	1,957	2,683
17	- 1,910	0,467	- 0,891
18	- 1,898	0,501	0,909

triméthyl-2,6,6 bicyclo (3.1.1)

heptanone-3 (pinocamphone)

isomère trans

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

28 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	118,98	17.6.5	109,37
1.2.3	109,96	17.6.1	109,81
2.3.4	104,75	10.1.6	121,27
i	4,26	12.7.3	113,98
i'	0,90	12.7.5	114,10
1.6.5	111,36	16.7.3	117,46
2.3.7	113,29	16.7.5	116,00
8.2.1	111,82	10.1.2	119,75
8.2.3	111,06	8.2.9	105,36
9.2.1	109,14	11.3.7	115,91
9.2.3	109,37	14.4.13	112,51
11.3.2	115,85	15.5.7	116,03
11.3.4	112,99	18.6.17	107,00
13.4.3	115,69	4.3.7	90,72
13.4.5	114,13	4.5.7	90,72
14.4.3	113,53	3.7.5	84,32
14.4.5	113,80	12.7.16	109,31
15.5.4	116,28	6.5.7	115,32
15.5.6	114,64	3.4.5	84,45
18.6.5	109,78	4.5.6	100,49
18.6.1	109,42		

Energie (kcal/mole)	
Wa	11,717
Wb	66,105
Wd	8,358
Wdp . . .	
ΣW	86,180
W_L	
$\Sigma W+W_L$	

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	$2\ 10^{-3}$ kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	4,53	4.5.6.1	50,50
6.1.2.8	119,33	4.5.6.17	70,83
6.1.2.9	124,50	4.5.6.18	172,06
10.1.2.3	175,47	15.5.6.1	175,98
10.1.2.8	60,67	15.5.6.17	54,64
10.1.2.9	55,50	15.5.6.18	62,47
1.2.3.11	169,17	7.5.6.1	45,33
1.2.3.4	43,98	7.5.6.17	166,67
1.2.3.7	53,33	7.5.6.18	76,22
8.2.3.11	66,52	2.3.7.5	83,05
8.2.3.4	168,29	2.3.7.12	163,07
8.2.3.7	70,97	2.3.7.16	33,36
9.2.3.11	49,34	11.3.7.5	139,48
9.2.3.4	75,85	11.3.7.12	25,60
9.2.3.7	173,16	11.3.7.16	104,11
2.3.4.13	23,19	4.3.7.5	23,36
2.3.4.14	155,48	4.3.7.12	90,52
2.3.4.5	90,95	4.3.7.16	139,77
11.3.4.13	103,78	3.7.5.15	143,29
11.3.4.14	28,50	3.7.5.4	23,36
11.3.4.5	142,07	3.7.5.6	78,61
7.3.4.13	137,53	12.7.5.15	29,53
7.3.4.14	90,18	12.7.5.4	90,40
7.3.4.5	23,39	12.7.5.6	167,63
3.4.5.15	143,10	16.7.5.15	98,87
3.4.5.6	92,54	16.7.5.4	141,20
3.4.5.7	23,39	16.7.5.6	39,24
13.4.5.15	101,19	5.6.1.2	0,95
13.4.5.6	23,17	17.6.1.2	122,51
13.4.5.7	139,09	18.6.1.2	120,33
14.4.5.15	29,81	5.6.1.10	179,05
14.4.5.6	154,16	17.6.1.10	57,49
14.4.5.7	89,91	18.6.1.10	59,67

FIGURE : 150

Atomes	coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,280	0,801	0
3	0,997	2,309	0,059
4	0	2,360	- 1,127
5	- 0,997	2,309	0,059
6	- 1,280	0,801	0
7	0	2,572	1,215
8	0	3,222	- 1,796
9	0	1,507	- 1,808
10	1,989	0,469	0,801
11 Me	2,380	0,357	- 1,510
12	1,886	2,968	0
13	- 1,886	2,968	0
14 Me	0	4,454	1,594
15 Me	0	1,257	2,614
16	- 1,989	0,469	0,801
17 Me	- 2,380	0,357	- 1,510
18	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
6.1.2	115,94
1.2.3	111,37
2.3.4	96,96
3.4.5	80,06
10.2.1	112,30
11.2.1	111,29
12.2.4	117,11
8.4.3	119,69
9.4.3	116,89
14.7.3	108,27
15.7.3	115,33
2.3.7	108,30
4.3.7	98,69
3.7.5	80,18
10.2.11	97,56
2.3.12	115,73
8.4.9	103,52
14.7.15	121,81
18.1.2	122,02

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	50,66
18.1.2.3	177,61
18.1.2.11	57,55
6.1.2.10	129,33
6.1.2.3	2,38
6.1.2.11	122,45
10.2.3.7	77,15
10.2.3.4	178,72
10.2.3.12	56,65
1.2.3.7	49,81
1.2.3.4	51,77
1.2.3.12	176,39
11.2.3.7	174,64
11.2.3.4	73,06
11.2.3.12	51,56
12.3.4.8	19,72
12.3.4.5	138,31
12.3.4.9	106,48
7.3.4.8	106,85
7.3.4.5	11,74
7.3.4.9	126,93
2.3.4.8	143,34
2.3.4.5	98,06
2.3.4.9	17,14
4.3.7.14	94,38
4.3.7.15	125,22
4.3.7.5	11,75
12.3.7.14	32,19
12.3.7.15	108,19
12.3.7.5	138,32
2.3.7.14	165,27
2.3.7.15	24,88
2.3.7.5	88,59

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	26,212
Wb . .	80,485
Wd . .	10,040
Wdp. .	
ΣW . .	116,737
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2'
ΔW	0,01kcal

tetraméthyl-2,4,6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

12 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

fonctions : H---Me, CO---H, CO---C, CO---Me, Me---Me du tableau 8

C---Me = $0,11e^{3,76(3,85-r)}$

FIGURE : 151

Atomes	coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,283	0,797	0
3	0,990	2,297	0,151
4	0	2,416	- 1,036
5	- 0,990	2,297	0,151
6	- 1,283	0,797	0
7	0	2,477	1,327
8	0	3,321	- 1,648
9	0	1,606	- 1,768
10 Me	2,545	0,159	1,299
11	1,904	0,584	- 0,908
12	1,871	2,969	0,134
13	- 1,871	2,969	0,134
14 Me	0	4,327	1,842
15 Me	0	1,059	2,622
16 Me	- 2,545	0,159	1,299
17	- 1,904	0,584	- 0,908
18	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
6.1.2	116,29
1.2.3	110,70
2.3.4	96,98
3.4.5	79,39
10.2.1	112,52
11.2.1	111,76
12.2.4	116,72
8.4.3	119,54
9.4.3	117,16
14.7.3	108,39
15.7.3	115,25
2.3.7	108,05
4.3.7	99,47
3.7.5	79,51
10.2.11	96,94
2.3.12	116,04
8.4.9	103,78
14.7.15	122,06
18.1.2	121,85

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	47,09
18.1.2.3	173,96
18.1.2.11	60,75
6.1.2.10	132,91
6.1.2.3	6,03
6.1.2.11	119,25
10.2.3.7	78,57
10.2.3.4	179,06
10.2.3.12	54,73
1.2.3.7	48,30
1.2.3.4	54,07
1.2.3.12	178,39
11.2.3.7	173,58
11.2.3.4	71,22
11.2.3.12	53,11
12.3.4.8	19,61
12.3.4.5	137,67
12.3.4.9	107,14
7.3.4.8	106,85
7.3.4.5	11,20
7.3.4.9	126,39
2.3.4.8	143,44
2.3.4.5	98,50
2.3.4.9	16,70
4.3.7.14	94,85
4.3.7.15	124,31
4.3.7.5	112,09
12.3.7.14	31,61
12.3.7.15	109,23
12.3.7.5	137,66
2.3.7.14	164,54
2.3.7.15	23,71
2.3.7.5	89,39

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	19,811
Wb . .	80,785
Wd . .	10,123
Wdp. .	
ΣW . .	110,719
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2'
ΔW	0,01kcal

tétraméthyl-2,4,6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

12 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

fonctions : H---Me, CO---H, CO---C, CO---Me, Me---Me du tableau 8

C---Me = $0,11e^{3,76(3,85-r)}$

FIGURE : 152

Atomes	coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,296	0,775	0
3	1,040	2,205	0,498
4	0	2,826	- 0,469
5	- 1,040	2,205	0,498
6	- 1,296	0,775	0
7	0	2,218	1,645
8	0	3,917	- 0,449
9	0	2,430	- 1,487
10	2,034	0,270	0,675
11 Br	2,124	0,773	- 1,755
12	1,981	2,767	0,660
13	- 1,981	2,767	0,660
14	0	3,826	2,694
15	0	0,715	2,839
16	- 2,034	0,270	0,675
17 Br	- 2,124	0,773	- 1,755
18	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
6.1.2	118,27
1.2.3	109,54
2.3.4	106,40
3.4.5	84,28
10.2.1	109,51
11.2.1	111,44
12.2.4	117,23
8.4.3	112,88
9.4.3	115,89
14.7.3	114,34
15.7.3	116,98
2.3.7	111,13
4.3.7	90,46
3.7.5	84,41
10.2.11	105,30
2.3.12	112,24
8.4.9	112,31
14.7.15	108,42
18.1.2	120,86

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	39,75
18.1.2.3	159,87
18.1.2.11	76,35
6.1.2.10	140,25
6.1.2.3	20,13
6.1.2.11	103,65
10.2.3.7	82,12
10.2.3.4	179,18
10.2.3.12	51,36
1.2.3.7	38,00
1.2.3.4	59,05
1.2.3.12	171,48
11.2.3.7	161,78
11.2.3.4	64,73
11.2.3.12	64,74
12.3.4.8	32,85
12.3.4.5	145,29
12.3.4.9	98,66
7.3.4.8	88,40
7.3.4.5	24,04
7.3.4.9	140,09
2.3.4.8	159,38
2.3.4.5	88,18
2.3.4.9	27,87
4.3.7.14	90,15
4.3.7.15	141,57
4.3.7.5	24,07
12.3.7.14	31,10
12.3.7.15	97,18
12.3.7.5	145,32
2.3.7.14	162,04
2.3.7.15	33,76
2.3.7.5	83,74

Energie (kcal/mole	
Wa . .	17,530
Wb . .	63,895
Wd . .	7,663
Wdp. .	7,428
ΣW . .	96,516
W_L . .	- 3,020
$\Sigma W+W_L$.	93,496

$\Delta\theta_{2.1.6}$	1"
ΔW	10^{-5}kcal

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3

cis αα' dibromée (bromes diaxiaux)

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

12 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ_D	4,50D

FIGURE : 153

Atomes	coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,295	0,776	0
3	1,025	2,288	- 0,035
4	0	2,491	- 1,175
5	- 1,025	2,288	- 0,035
6	- 1,295	0,776	0
7	0	2,770	1,011
8	0	3,509	- 1,569
9	0	1,713	- 1,941
10	1,959	0,487	0,855
11 Br	2,345	0,275	- 1,553
12	1,967	2,867	- 0,110
13	- 1,967	2,867	- 0,110
14	0	4,679	1,218
15	0	1,945	2,745
16	- 1,959	0,487	0,855
17 Br	- 2,345	0,275	- 1,553
18	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
6.1.2	118,14
1.2.3	110,80
2.3.4	105,20
3.4.5	82,83
10.2.1	112,06
11.2.1	109,33
12.2.4	116,13
8.4.3	112,59
9.4.3	114,75
14.7.3	112,32
15.7.3	118,26
2.3.7	114,05
4.3.7	91,03
3.7.5	83,32
10.2.11	102,94
2.3.12	111,54
8.4.9	114,28
14.7.15	109,28
18.1.2	120,93

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	55,45
18.1.2.3	178,59
18.1.2.11	58,02
6.1.2.10	124,55
6.1.2.3	1,41
6.1.2.11	121,98
10.2.3.7	76,52
10.2.3.4	174,72
10.2.3.12	58,18
1.2.3.7	49,44
1.2.3.4	48,75
1.2.3.12	175,86
11.2.3.7	170,01
11.2.3.4	71,82
11.2.3.12	55,29
12.3.4.8	33,87
12.3.4.5	145,82
12.3.4.9	99,73
7.3.4.8	86,66
7.3.4.5	25,29
7.3.4.9	139,74
2.3.4.8	157,94
2.3.4.5	90,11
2.3.4.9	24,34
4.3.7.14	86,39
4.3.7.15	144,30
4.3.7.5	25,34
12.3.7.14	34,04
12.3.7.15	95,27
12.3.7.5	145,76
2.3.7.14	166,39
2.3.7.15	37,07
2.3.7.5	81,89

Energie (kcal/mole	
Wa . .	17,172
Wb . .	66,478
Wd . .	7,471
Wdp. .	8,075
ΣW . .	99,196
W_L . .	- 3,000
$\Sigma W+W_L$.	96,196

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-3}kcal

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3

cis αα' dibromée (Bromes diéquatoriaux)

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

12 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ_D	4,93D

FIGURE : 154

Atomes	coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,295	0,777	0
3	1,045	2,186	0,557
4	0	2,844	- 0,380
5	- 1,045	2,186	0,557
6	- 1,295	0,777	0
7	0	2,166	1,699
8	0	3,934	- 0,321
9	0	2,484	- 1,412
10 Br	2,688	- 0,148	0,984
11	1,675	0,858	- 1,050
12	1,968	2,769	0,747
13	- 1,968	2,769	0,747
14	0	3,773	2,750
15	0	0,633	2,855
16 Br	- 2,688	- 0,148	0,839
17	- 1,675	0,858	- 1,050
18	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
6.1.2	118,11
1.2.3	109,41
2.3.4	106,27
3.4.5	84,77
10.2.1	111,75
11.2.1	109,18
12.2.4	116,23
8.4.3	113,02
9.4.3	115,53
14.7.3	113,12
15.7.3	117,06
2.3.7	111,42
4.3.7	89,80
3.7.5	84,91
10.2.11	105,45
2.3.12	114,19
8.4.9	112,33
14.7.15	109,78
18.1.2	120,95

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	33,10
18.1.2.3	157,40
18.1.2.11	83,17
6.1.2.10	146,90
6.1.2.3	22,60
6.1.2.11	96,83
10.2.3.7	87,94
10.2.3.4	175,71
10.2.3.12	46,23
1.2.3.7	36,37
1.2.3.4	59,98
1.2.3.12	170,54
11.2.3.7	155,80
11.2.3.4	59,45
11.2.3.12	70,04
12.3.4.8	30,99
12.3.4.5	143,80
12.3.4.9	100,35
7.3.4.8	88,43
7.3.4.5	24,39
7.3.4.9	140,24
2.3.4.8	159,28
2.3.4.5	87,90
2.3.4.9	27,95
4.3.7.14	88,58
4.3.7.15	142,28
4.3.7.5	24,42
12.3.7.14	30,84
12.3.7.15	98,31
12.3.7.5	143,83
2.3.7.14	164,00
2.3.7.15	34,85
2.3.7.5	83,01

Energie (kcal/mole	
Wa . .	12,463
Wb . .	63,330
Wd . .	7,775
Wdp. .	8,434
ΣW . .	92,002
W_L . .	- 1,239
$\Sigma W+W_L$.	90,763

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-5}kcal

<u>diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3</u>

cis αα' dibromée (bromes diéquatoriaux)

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

12 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ_D	5,09

FIGURE : 155

Atomes	coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,295	0,776	0
3	1,025	2,288	- 0,035
4	0	2,491	- 1,175
5	- 1,025	2,288	- 0,035
6	- 1,295	0,776	0
7	0	2,770	1,011
8	0	3,510	- 1,569
9	0	1,712	- 1,941
10 Br	2,445	0,276	1,481
11	1,901	0,487	- 0,897
12	1,966	2,868	- 0,110
13	- 1,966	2,868	- 0,110
14	0	4,679	1,218
15	0	1,944	2,744
16 Br	- 2,445	0,276	1,481
17	- 1,901	0,487	- 0,897
18	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
6.1.2	118,14
1.2.3	110,80
2.3.4	105,20
3.4.5	82,83
10.2.1	112,06
11.2.1	109,33
12.2.4	116,13
8.4.3	112,59
9.4.3	114,75
14.7.3	112,32
15.7.3	118,26
2.3.7	114,05
4.3.7	91,05
3.7.5	83,31
10.2.11	102,94
2.3.12	111,56
8.4.9	114,36
14.7.15	109,33
18.1.2	120,93

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	55,44
18.1.2.3	178,59
18.1.2.11	58,03
6.1.2.10	124,56
6.1.2.3	1,41
6.1.2.11	121,97
10.2.3.7	76,53
10.2.3.4	174,74
10.2.3.12	58,17
1.2.3.7	49,45
1.2.3.4	48,76
1.2.3.12	175,86
11.2.3.7	170,01
11.2.3.4	71,80
11.2.3.12	55,30
12.3.4.8	33,88
12.3.4.5	145,80
12.3.4.9	99,79
7.3.4.8	86,63
7.3.4.5	25,28
7.3.4.9	139,70
2.3.4.8	157,97
2.3.4.5	90,12
2.3.4.9	24,30
4.3.7.14	86,37
4.3.7.15	144,27
4.3.7.5	25,33
12.3.7.14	34,04
12.3.7.15	95,32
12.3.7.5	145,74
2.3.7.14	166,40
2.3.7.15	37,04
2.3.7.5	81,90

Energie (kcal/mole	
Wa . .	12,617
Wb . .	66,523
Wd . .	7,474
Wdp. .	7,788
ΣW . .	94,402
W_L . .	- 1,122
$\Sigma W+W_L$.	93,280

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,04kcal

<u>diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3</u>

cis αα' dibromée (bromes diaxiaux)

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

12 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ_D	4,84D

FIGURE : 156

Atomes	coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,297	0,774	0
3	1,039	2,183	0,556
4	0	2,856	- 0,376
5	- 1,039	2,183	0,556
6	- 1,297	0,774	0
7	0	2,152	1,703
8	0	3,945	- 0,291
9	0	2,531	- 1,419
10 Br	2,685	- 0,148	0,992
11	1,679	0,855	- 1,050
12	1,959	2,767	0,754
13	- 1,959	2,767	0,754
14	0	3,745	2,775
15	0	0,607	2,843
16 Br	- 2,685	- 0,148	0,992
17	- 1,679	0,855	- 1,050
18	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
6.1.2	108,32
1.2.3	109,04
2.3.4	107,04
3.4.5	84,21
10.2.1	111,78
11.2.1	109,27
12.2.4	115,80
8.4.3	112,72
9.4.3	116,40
14.7.3	113,40
15.7.3	117,13
2.3.7	111,24
4.3.7	90,24
3.7.5	84,34
10.2.11	105,62
2.3.12	114,17
8.4.9	111,81
14.7.15	109,62
18.1.2	120,84

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	33,40
18.1.2.3	157,49
18.1.2.11	83,14
6.1.2.10	146,60
6.1.2.3	22,51
6.1.2.11	96,86
10.2.3.7	87,22
10.2.3.4	175,67
10.2.3.12	46,13
1.2.3.7	36,87
1.2.3.4	60,24
1.2.3.12	170,22
11.2.3.7	156,24
11.2.3.4	59,13
11.2.3.12	70,42
12.3.4.8	31,51
12.3.4.5	143,74
12.3.4.9	99,61
7.3.4.8	87,54
7.3.4.5	24,69
7.3.4.9	141,35
2.3.4.8	160,12
2.3.4.5	87,66
2.3.4.9	29,00
4.3.7.14	88,37
4.3.7.15	142,37
4.3.7.5	24,72
12.3.7.14	30,68
12.3.7.15	98,59
12.3.7.5	143,77
2.3.7.14	163,21
2.3.7.15	33,94
2.3.7.5	83,71

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3

cis αα' dibromée (Br diéquatoriaux)

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

12 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63}$ - $325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r}$ - $140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r}$ - $49,2/r^6$ r≥2,4Å

- 10,162r + 24,29 r<2,4Å

fonctions : C---Me, H---Me, CO---H, CO---C

CO---Me, CO---Br, Br---Br, Br---Me, Br---H, Br---C

du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br_{10}	1,9
C - Br_{16}	1,9
μ_D	5,09D

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	10,936
Wb . .	63,436
Wd . .	7,709
Wdp. .	8,426
ΣW . .	90,507
W_L . .	- 1,236
$\Sigma W+W_L$.	89,271

$\Delta\theta_{2.1.6}$ / ΔW	2" / $5\ 10^{-4}$ kcal

FIGURE : 157

Atomes	coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,312	0,747	0
3	1,056	2,260	- 0,071
4	0	2,441	- 1,191
5	- 1,056	2,260	- 0,071
6	- 1,312	0,747	0
7	0	2,726	0,960
8	0	3,428	- 1,657
9	0	1,658	- 1,952
10 Br	2,396	0,281	1,540
11	1,993	0,398	- 0,818
12	1,969	2,882	- 0,154
13	- 1,969	2,882	- 0,154
14	0	4,633	1,183
15	0	1,891	2,689
16 Br	- 2,396	0,281	1,540
17	- 1,993	0,398	- 0,818
18	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
6.1.2	120,69
1.2.3	110,03
2.3.4	105,17
3.4.5	85,90
10.2.1	111,49
11.2.1	111,98
12.2.4	116,25
8.4.3	114,46
9.4.3	114,87
14.7.3	112,10
15.7.3	117,91
2.3.7	112,32
4.3.7	88,93
3.7.5	86,07
10.2.11	99,53
2.3.12	114,78
8.4.9	110,57
14.7.15	109,11
18.1.2	119,66

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	58,58
18.1.2.3	177,19
18.1.2.11	51,96
6.1.2.10	121,42
6.1.2.3	2,81
6.1.2.11	128,04
10.2.3.7	75,57
10.2.3.4	170,76
10.2.3.12	60,23
1.2.3.7	48,66
1.2.3.4	46,53
1.2.3.12	175,54
11.2.3.7	173,89
11.2.3.4	78,70
11.2.3.12	50,31
12.3.4.8	27,77
12.3.4.5	142,78
12.3.4.9	101,70
7.3.4.8	91,21
7.3.4.5	23,80
7.3.4.9	139,31
2.3.4.8	155,92
2.3.4.5	89,07
2.3.4.9	26,45
4.3.7.14	88,47
4.3.7.15	143,52
4.3.7.5	23,84
12.3.7.14	30,45
12.3.7.15	97,55
12.3.7.5	142,77
2.3.7.14	165,55
2.3.7.15	37,54
2.3.7.5	82,14

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3

cis αα' dibromée (Br. diaxiaux)

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

12 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r}$ - $325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r}$ - $140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r}$ - $49,2/r^6$ r≥2,4Å

- 10,162r + 24,29 r<2,4Å

fonctions : C---Me, H---Me, CO---H, CO---C, CO---Me, CO---Br, Br---Br, Br---Me, Br---H, Br---C du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br_{10}	1,9
C - Br_{16}	1,9
μ_D	4,86D

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	12,582
Wb . .	66,734
Wd . .	8,050
Wdp. .	7,802
ΣW . .	95,168
W_L . .	- 1,029
$\Sigma W+W_L$.	94,139

$\Delta\theta_{2.1.6}$ / ΔW	1" / 5.10^{-3} kcal

FIGURE : 158

Atomes	coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,288	0,789	0
3	1,042	2,203	0,547
4	0	2,848	- 0,403
5	- 1,042	2,203	0,547
6	- 1,288	0,789	0
7	0	2,191	1,692
8	0	3,939	- 0,353
9	0	2,490	- 1,435
10	2,064	0,265	0,613
11	2,051	0,862	- 1,782
12	1,982	2,762	0,723
13	- 1,982	2,762	0,723
14	0	3,770	2,785
15	0	0,646	2,833
16	- 2,064	0,265	0,613
17	- 2,051	0,862	- 1,782
18	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
6.1.2	117,00
1.2.3	110,16
2.3.4	105,80
3.4.5	84,44
10.2.1	110,30
11.2.1	110,81
12.2.4	117,23
8.4.3	112,79
9.4.3	116,27
14.7.3	114,48
15.7.3	116,48
2.3.7	111,33
4.3.7	90,26
3.7.5	84,58
10.2.11	104,33
2.3.12	112,66
8.4.9	111,76
14.7.15	108,87
18.1.2	121,50

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	35,72
18.1.2.3	157,71
18.1.2.11	79,31
6.1.2.10	144,28
6.1.2.3	22,29
6.1.2.11	100,70
10.2.3.7	85,52
10.2.3.4	177,85
10.2.3.12	48,54
1.2.3.7	36,47
1.2.3.4	60,16
1.2.3.12	170,53
11.2.3.7	159,45
11.2.3.4	62,82
11.2.3.12	66,49
12.3.4.8	32,85
12.3.4.5	145,26
12.3.4.9	98,13
7.3.4.8	88,28
7.3.4.5	24,13
7.3.4.9	140,74
2.3.4.8	159,43
2.3.4.5	88,16
2.3.4.9	28,45
4.3.7.14	90,30
4.3.7.15	141,10
4.3.7.5	24,16
12.3.7.14	30,82
12.3.7.15	97,78
12.3.7.5	145,29
2.3.7.14	162,59
2.3.7.15	34,00
2.3.7.5	82,94

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3

cis αα' dibromée (Br. diaxiaux)

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

12 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

fonctions : C---Me, H---Me, CO---H, CO---C, CO---Me du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br_{11}	1,9
C - Br_{17}	1,9
μ_D	4,45D

Energie (kcal/mole	
Wa . .	16,642
Wb . .	63,936
Wd . .	7,666
Wdp. .	7,461
ΣW . .	95,705
W_L . .	- 3,334
$\Sigma W+W_L$.	92,371

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,01kcal

FIGURE : 159

Atomes	coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,295	0,777	0
3	1,045	2,186	- 0,557
4	0	2,026	- 1,690
5	- 1,045	2,186	- 0,557
6	- 1,295	0,777	0
7	0	2,951	0,291
8	0	1,028	- 2,133
9	0	2,815	- 2,445
10	1,760	0,809	1,019
11 Br	2,584	- 0,134	- 1,128
12	1,968	2,742	- 0,816
13	- 1,968	2,742	- 0,816
14	0	4,843	- 0,039
15	0	2,622	2,183
16	- 1,760	0,809	1,019
17 Br	- 2,584	- 0,134	- 1,128
18	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
6.1.2	118,10
1.2.3	109,41
2.3.4	106,27
3.4.5	84,77
10.2.1	111,75
11.2.1	109,18
12.2.4	116,23
8.4.3	113,02
9.4.3	115,53
14.7.3	113,12
15.7.3	117,06
2.3.7	111,42
4.3.7	89,81
3.7.5	84,91
10.2.11	105,45
2.3.12	114,19
8.4.9	112,35
14.7.15	109,78
18.1.2	120,95

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	78,29
18.1.2.3	157,41
18.1.2.11	37,98
6.1.2.10	101,71
6.1.2.3	22,60
6.1.2.11	142,02
10.2.3.7	64,83
10.2.3.4	161,18
10.2.3.12	69,33
1.2.3.7	59,48
1.2.3.4	36,88
1.2.3.12	166,36
11.2.3.7	178,90
11.2.3.4	82,55
11.2.3.12	46,93
12.3.4.8	103,39
12.3.4.5	143,80
12.3.4.9	27,96
7.3.4.8	137,20
7.3.4.5	24,39
7.3.4.9	91,45
2.3.4.8	24,91
2.3.4.5	87,90
2.3.4.9	156,26
4.3.7.14	88,58
4.3.7.15	142,28
4.3.7.5	24,42
12.3.7.14	30,84
12.3.7.15	98,31
12.3.7.5	143,83
2.3.7.14	163,99
2.3.7.15	34,85
2.3.7.5	83,01

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3

cis αα' dibromée (Br. diéquatoriaux)

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

12 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

fonctions : C---Me, H---Me, CO---H, CO---C, CO---Me du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br_{11}	1,9
C - Br_{17}	1,9
μ_D	5,179

Energie (kcal/mole	
Wa . .	19,160
Wb . .	63,297
Wd . .	8,025
Wdp. .	8,716
ΣW . .	99,198
W_L . .	- 2,403
$\Sigma W+W_L$.	96,795

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2'
ΔW	0,1 kcal

FIGURE : 160

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,283	0,797	0
3	0,990	2,297	0,151
4	0	2,417	- 1,036
5	0,990	2,297	0,151
6	- 1,283	0,797	0
7	0	2,504	1,056
8	0	3,321	- 1,648
9	0	1,607	- 1,768
10 Br	2,558	0,153	1,312
11	1,904	0,584	- 0,908
12	2,001	2,724	0,001
13	- 2,001	2,724	0,001
14	0	4,165	2,019
15	0	1,328	2,370
16 Br	- 2,558	0,153	1,312
17	- 1,904	0,584	- 0,908
18	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	116,29
1.2.3	110,70
2.3.4	96,99
3.4.5	79,39
10.2.1	112,52
11.2.1	111,76
12.3.4	116,72
8.4.3	119,55
9.4.3	117,16
14.7.3	108,39
15.7.3	115,26
2.3.7	108,06
14.7.15	101,42
8.4.9	101,98
18.1.2	121,85

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	47,08
18.1.2.11	60,74
10.2.3.12	60,05
11.2.3.12	47,78
10.2.3.7	86,27
10.2.3.4	178,88
1.2.3.7	40,61
1.2.3.4	54,07
1.2.3.12	173,03
11.2.3.7	165,90
11.2.3.4	71,22
12.3.4.14	37,50
12.3.4.15	89,25

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	12,404
Wb . .	63,298
Wd . .	9,608
Wdp. .	6,909
ΣW . .	92,219

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br	1,7
μ_D	3,729D

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3

cis αα' dibromée (Br diéquatoriaux)

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

12 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ r > 2,4Å

$- 10,162r + 24,29$ r < 2,4Å

Me---H, CO---H, CO---C, CO---Me, Br---H, Br---C, Br---Me, Br---Br du tableau 8

C---Me = $0,11e^{3,76(3,85-r)}$

FIGURE : 161

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,279	0,803	0
3	0,995	2,297	0,219
4	0	2,471	- 0,956
5	- 0,995	2,297	0,219
6	- 1,279	0,803	0
7	0	2,471	1,129
8	0	3,401	- 1,528
9	0	1,690	- 1,719
10	2,030	0,403	0,728
11 Br	2,286	0,514	- 1,632
12	2,008	2,728	0,089
13	- 2,008	2,728	0,089
14	0	4,107	2,133
15	0	1,271	2,400
16	- 2,030	0,403	0,728
17 Br	- 2,286	0,514	- 1,632
18	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.6	115,73
1.2.3	111,16
2.3.4	96,87
3.4.5	79,92
10.2.1	112,22
11.2.1	111,14
12.3.4	116,98
8.4.3	119,55
9.4.3	116,71
14.7.3	108,12
15.7.3	115,21
2.3.7	108,16
14.7.15	103,47
8.4.9	102,96
18.1.2	122,13

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	44,59
18.1.2.11	64,44
10.2.3.12	58,79
11.2.3.12	50,24
10.2.3.7	87,85
10.2.3.4	178,11
1.2.3.7	38,75
1.2.3.4	55,29
1.2.3.12	174,57
11.2.3.7	163,11
11.2.3.4	69,07
12.3.4.14	37,28
12.3.4.15	89,40

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	13,054
Wb . .	63,719
Wd . .	6,622
Wdp. .	11,874
ΣW . .	95,269

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	1,9
μ_D	3,375D

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanone-3

cis αα' dibromée (Br diaxiaux)

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

12 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ r > 2,4Å

$- 10,162r + 24,29$ r < 2,4Å

Me---H, CO---H, CO---C, CO---Me, Br---H, Br---C, Br---Me, Br---Br du tableau 8

C---Me = $0,11e^{3,76(3,85-r)}$

FIGURE : 162

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,296	0,774	0
3	1,031	2,283	0,110
4	- 0,007	2,609	- 0,991
5	- 1,052	2,287	0,104
6	- 1,296	0,774	0
7	- 0,013	2,628	1,203
8 Br	2,528	0,149	1,362
9	1,813	0,578	- 0,974
10	- 0,002	- 1,225	0
11	1,946	2,907	0,076
12	- 0,012	4,486	1,688
13	- 0,022	1,920	- 1,838
14	0	3,656	- 1,302
15	- 1,972	2,903	0,066
16	- 0,005	1,555	2,796
17	- 1,839	0,579	- 0,960
18 Br	- 2,506	0,137	1,376

Angles (d°)			
2.1.6	118,29	17.6.5	112,02
1.2.3	110,82	17.6.1	111,52
2.3.4	105,77	10.1.6	120,74
i	4,12	12.7.3	113,14
i'	3,89	12.7.5	113,10
1.6.5	111,61	16.7.3	117,25
2.3.7	112,67	16.7.5	117,89
8.2.1	112,32	10.1.2	120,96
8.2.3	112,08	8.2.9	105,19
9.2.1	107,82	11.3.7	116,92
9.2.3	108,30	14.4.13	112,63
11.3.2	114,07	15.5.7	117,31
11.3.4	114,40	18.6.17	104,40
13.4.3	115,37	4.3.7	90,21
13.4.5	114,06	4.5.7	90,21
14.4.3	113,60	3.7.5	84,40
14.4.5	113,89	12.7.16	109,32
15.5.4	114,88	6.5.7	111,81
15.5.6	114,37	3.4.5	84,54
18.6.5	107,88	4.5.6	105,34
18.6.1	109,05		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	4,40	4.5.6.1	50,51
6.1.2.8	130,61	4.5.6.17	69,27
6.1.2.9	113,96	4.5.6.18	176,37
10.1.2.3	175,60	15.5.6.1	177,62
10.1.2.8	49,39	15.5.6.17	57,83
10.1.2.9	66,04	15.5.6.18	56,53
1.2.3.11	177,79	7.5.6.1	46,02
1.2.3.4	51,18	7.5.6.17	165,81
1.2.3.7	45,83	7.5.6.18	79,84
8.2.3.11	55,87	2.3.7.5	82,90
8.2.3.4	177,52	2.3.7.12	164,34
8.2.3.7	80,51	2.3.7.16	35,67
9.2.3.11	59,72	11.3.7.5	142,03
9.2.3.4	66,89	11.3.7.12	29,27
9.2.3.7	163,90	11.3.7.16	99,39
2.3.4.13	24,74	4.3.7.5	24,32
2.3.4.14	156,95	4.3.7.12	88,44
2.3.4.5	89,33	4.3.7.16	142,89
11.3.4.13	101,66	3.7.5.15	142,70
11.3.4.14	30,55	3.7.5.4	24,32
11.3.4.5	144,26	3.7.5.6	82,32
7.3.4.13	138,42	12.7.5.15	29,90
7.3.4.14	89,37	12.7.5.4	88,48
7.3.4.5	24,34	12.7.5.6	164,88
3.4.5.15	144,83	16.7.5.15	99,35
3.4.5.6	88,37	16.7.5.4	142,26
3.4.5.7	24,34	16.7.5.6	35,62
13.4.5.15	99,78	5.6.1.2	4,19
13.4.5.6	27,01	17.6.1.2	114,90
13.4.5.7	139,73	18.6.1.2	130,33
14.4.5.15	31,41	5.6.1.10	175,81
14.4.5.6	158,20	17.6.1.10	65,10
14.4.5.7	89,08	18.6.1.10	49,67

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1)
heptanone-3
cis αα' (bromes diéquatoriaux)
(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)
28 variables
fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ_D	4,93D

Energie (kcal/mole)	
Wa	10,345
Wb	64,340
Wd	7,924
Wdp . . .	8,127
ΣW	90,737
W_L	- 1,079
$\Sigma W+W_L$	89,658

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	2 10^{-4} kcal

FIGURE : 163

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,298	0,771	0
3	1,033	2,283	- 0,061
4	- 0,004	2,492	- 1,191
5	- 1,048	2,285	- 0,066
6	- 1,298	0,771	0
7	- 0,010	2,745	0,989
8 Br	2,462	0,281	1,473
9	1,865	0,482	- 0,922
10	0,001	- 1,225	0
11	1,946	2,904	- 0,153
12	- 0,011	4,645	1,262
13	- 0,005	1,715	- 1,958
14	- 0,002	3,505	- 1,599
15	- 1,968	2,895	- 0,161
16	- 0,017	1,864	2,695
17	- 1,884	0,489	- 0,912
18 Br	- 2,449	0,264	1,477

Angles (d°)			
2.1.6	118,60	17.6.5	112,80
1.2.3	110,74	17.6.1	112,13
2.3.4	106,12	10.1.6	120,75
i	2,26	12.7.3	113,07
i'	2,48	12.7.5	112,95
1.6.5	111,29	16.7.3	117,86
2.3.7	112,51	16.7.5	117,81
8.2.1	112,74	10.1.2	120,65
8.2.3	112,47	8.2.9	104,88
9.2.1	107,64	11.3.7	116,36
9.2.3	107,98	14.4.13	113,36
11.3.2	114,36	15.5.7	116,79
11.3.4	114,53	18.6.17	104,11
13.4.3	114,66	4.3.7	90,17
13.4.5	114,50	4.5.7	90,17
14.4.3	113,42	3.7.5	84,34
14.4.5	113,40	12.7.16	109,12
15.5.4	115,10	6.5.7	111,85
15.5.6	114,29	3.4.5	84,47
18.6.5	107,33	4.5.6	105,86
18.6.1	108,75		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	2,41	4.5.6.1	47,05
6.1.2.8	124,57	4.5.6.17	71,83
6.1.2.9	120,25	4.5.6.18	174,08
10.1.2.3	177,58	15.5.6.1	174,78
10.1.2.8	55,43	15.5.6.17	55,90
10.1.2.9	59,75	15.5.6.18	58,19
1.2.3.11	174,90	7.5.6.1	49,68
1.2.3.4	47,64	7.5.6.17	168,56
1.2.3.7	49,43	7.5.6.18	77,35
8.2.3.11	57,95	2.3.7.5	83,02
8.2.3.4	174,79	2.3.7.12	164,42
8.2.3.7	77,72	2.3.7.16	35,52
9.2.3.11	57,28	11.3.7.5	142,25
9.2.3.4	69,97	11.3.7.12	29,69
9.2.3.7	167,05	11.3.7.16	99,21
2.3.4.13	25,49	4.3.7.5	24,55
2.3.4.14	157,90	4.3.7.12	88,02
2.3.4.5	88,96	4.3.7.16	143,09
11.3.4.13	101,67	3.7.5.15	143,02
11.3.4.14	30,74	3.7.5.4	24,55
11.3.4.5	143,88	3.7.5.6	82,65
7.3.4.13	139,03	12.7.5.15	30,33
7.3.4.14	88,56	12.7.5.4	88,14
7.3.4.5	24,58	12.7.5.6	164,67
3.4.5.15	144,51	16.7.5.15	98,39
3.4.5.6	88,24	16.7.5.4	143,15
3.4.5.7	24,58	16.7.5.6	35,95
13.4.5.15	100,87	5.6.1.2	2,66
13.4.5.6	26,38	17.6.1.2	120,69
13.4.5.7	139,20	18.6.1.2	124,74
14.4.5.15	31,35	5.6.1.10	177,34
14.4.5.6	158,60	17.6.1.10	59,31
14.4.5.7	88,58	18.6.1.10	55,26

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1)
heptanone-3
cis αα' dibromée (bromes diaxiaux)
28 variables
fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ_D	4,83D

Energie (kcal/mole)	
Wa	10,878
Wb	64,670
Wd	7,884
Wdp . . .	7,953
ΣW	91,385
W_L	- 1,029
$\Sigma W+W_L$	90,356

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

FIGURE : 164

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,301	0,766	0
3	1,023	2,276	0,018
4	0,006	2,560	- 1,114
5	- 1,056	2,282	- 0,022
6	- 1,301	0,766	0
7	- 0,036	2,660	1,082
8	1,946	0,470	0,867
9 Br	2,327	0,312	- 1,583
10	0,011	- 1,225	0
11	1,922	2,922	- 0,034
12	- 0,042	4,527	1,528
13	- 0,010	1,864	- 1,955
14	0,021	3,598	- 1,455
15	- 1,978	2,895	- 0,073
16	- 0,099	1,608	2,688
17 Br	- 2,356	0,247	- 1,543
18	- 1,901	0,502	0,908

Angles (d°)			
2.1.6	119,04	17.6.5	109,29
1.2.3	110,03	17.6.1	109,98
2.3.4	106,93	10.1.6	120,99
i	0,66	12.7.3	113,69
i'	- 0,84	12.7.5	113,60
1.6.5	111,28	16.7.3	117,46
2.3.7	112,02	16.7.5	116,17
8.2.1	111,22	10.1.2	119,97
8.2.3	110,83	8.2.9	105,36
9.2.1	109,70	11.3.7	116,26
9.2.3	109,59	14.4.13	111,48
11.3.2	115,16	15.5.7	116,45
11.3.4	113,09	18.6.17	106,91
13.4.3	117,10	4.3.7	90,45
13.4.5	114,72	4.5.7	90,45
14.4.3	113,15	3.7.5	84,24
14.4.5	113,60	12.7.16	109,81
15.5.4	116,02	6.5.7	109,58
15.5.6	114,42	3.4.5	84,37
18.6.5	109,83	4.5.6	107,30
18.6.1	109,46		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	0,69	4.5.6.1	49,91
6.1.2.8	123,90	4.5.6.17	74,44
6.1.2.9	119,94	4.5.6.18	168,57
10.1.2.3	179,31	15.5.6.1	177,16
10.1.2.8	56,10	15.5.6.17	55,80
10.1.2.9	60,06	15.5.6.18	61,19
1.2.3.11	176,98	7.5.6.1	49,95
1.2.3.4	50,40	7.5.6.17	171,31
1.2.3.7	47,18	7.5.6.18	71,70
8.2.3.11	59,60	2.3.7.5	84,35
8.2.3.4	173,83	2.3.7.12	162,38
8.2.3.7	76,24	2.3.7.16	32,21
9.2.3.11	56,27	11.3.7.5	140,34
9.2.3.4	70,31	11.3.7.12	27,06
9.2.3.7	167,89	11.3.7.16	103,10
2.3.4.13	25,89	4.3.7.5	24,15
2.3.4.14	157,67	4.3.7.12	89,12
2.3.4.5	89,05	4.3.7.16	140,72
11.3.4.13	101,91	3.7.5.15	143,74
11.3.4.14	29,87	3.7.5.4	24,15
11.3.4.5	143,15	3.7.5.6	84,42
7.3.4.13	139,12	12.7.5.15	30,38
7.3.4.14	89,11	12.7.5.4	89,22
7.3.4.5	24,18	12.7.5.6	162,21
3.4.5.15	144,14	16.7.5.15	98,43
3.4.5.6	86,52	16.7.5.4	141,98
3.4.5.7	24,18	16.7.5.6	33,40
13.4.5.15	98,56	5.6.1.2	0,89
13.4.5.6	30,77	17.6.1.2	122,47
13.4.5.7	141,47	18.6.1.2	120,35
14.4.5.15	31,31	5.6.1.10	179,11
14.4.5.6	160,64	17.6.1.10	57,53
14.4.5.7	88,65	18.6.1.10	59,65

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1)
heptanone-3
cis αα' dibromée (bromes diaxiaux)
(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)
28 variables
fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa	9,810
Wb	62,871
Wd	7,996
Wdp . . .	6,889
ΣW	87,566
W_L	- 2,605
$\Sigma W+W_L$	84,961

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br_9	1,9
C - Br_{17}	1,9
μ_D	4,92D

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	4 10^{-4} kcal

FIGURE : 165

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,302	0,765	0
3	1,029	2,276	- 0,043
4	- 0,006	2,499	- 1,172
5	- 1,051	2,279	- 0,051
6	- 1,302	0,765	0
7	- 0,015	2,712	1,017
8	1,939	0,497	0,882
9 Br	2,345	0,255	- 1,554
10	0,014	- 1,225	0
11	1,925	2,921	- 0,141
12	- 0,012	4,598	1,377
13	- 0,020	1,743	- 1,959
14	0	3,514	- 1,576
15	- 1,969	2,897	- 0,111
16	- 0,059	1,736	2,669
17 Br	- 2,376	0,220	- 1,521
18	- 1,890	0,516	0,920

Angles (d°)			
2.1.6	119,13	17.6.5	109,39
1.2.3	110,20	17.6.1	109,89
2.3.4	106,32	10.1.6	121,07
i	1,59	12.7.3	113,83
i'	1,91	12.7.5	113,87
1.6.5	111,03	16.7.3	117,42
2.3.7	112,18	16.7.5	115,82
8.2.1	111,65	10.1.2	119,80
8.2.3	110,99	8.2.9	105,20
9.2.1	109,29	11.3.7	116,18
9.2.3	109,37	14.4.13	112,10
11.3.2	115,56	15.5.7	115,80
11.3.4	113,08	18.6.17	106,92
13.4.3	115,74	4.3.7	90,42
13.4.5	114,53	4.5.7	90,42
14.4.3	113,61	3.7.5	84,31
14.4.5	113,82	12.7.16	109,75
15.5.4	116,18	6.5.7	111,19
15.5.6	114,62	3.4.5	84,45
18.6.5	109,93	4.5.6	105,92
18.6.1	109,58		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	1,69	4.5.6.1	47,30
6.1.2.8	122,13	4.5.6.17	74,12
6.1.2.9	121,91	4.5.6.18	168,76
10.1.2.3	178,31	15.5.6.1	176,76
10.1.2.8	57,87	15.5.6.17	55,33
10.1.2.9	58,09	15.5.6.18	61,79
1.2.3.11	174,55	7.5.6.1	49,52
1.2.3.4	48,18	7.5.6.17	170,95
1.2.3.7	49,15	7.5.6.18	71,93
8.2.3.11	61,26	2.3.7.5	83,81
8.2.3.4	172,38	2.3.7.12	162,58
8.2.3.7	75,05	2.3.7.16	32,39
9.2.3.11	54,37	11.3.7.5	140,17
9.2.3.4	71,98	11.3.7.12	26,56
9.2.3.7	169,32	11.3.7.16	103,63
2.3.4.13	25,36	4.3.7.5	24,04
2.3.4.14	157,17	4.3.7.12	89,57
2.3.4.5	89,23	4.3.7.16	140,24
11.3.4.13	102,47	3.7.5.15	143,62
11.3.4.14	29,33	3.7.5.4	24,04
11.3.4.5	142,93	3.7.5.6	83,24
7.3.4.13	138,67	12.7.5.15	30,05
7.3.4.14	89,53	12.7.5.4	89,53
7.3.4.5	24,67	12.7.5.6	163,19
3.4.5.15	143,31	16.7.5.15	98,61
3.4.5.6	88,15	16.7.5.4	141,82
3.4.5.7	24,07	16.7.5.6	34,53
13.4.5.15	100,88	5.6.1.2	2,04
13.4.5.6	27,66	17.6.1.2	123,68
13.4.5.7	139,88	18.6.1.2	119,11
14.4.5.15	29,93	5.6.1.10	177,96
14.4.5.6	158,47	17.6.1.10	56,32
14.4.5.7	89,32	18.6.1.10	60,89

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1)
heptanone-3
cis αα' dibromée (bromes diéquatoriaux)
(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)
28 variables
fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa	9,687
Wb	62,992
Wd	8,130
Wdp . . .	6,993
ΣW	87,802
W_L	- 2,692
$\Sigma W+W_L$	85,110

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br_9	1,9
C - Br_{17}	1,9
μ_D	4,44D

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,02 kcal

FIGURE : 166

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,301	0,767	0
3	1,022	2,273	0,114
4	0,032	2,579	- 1,036
5	- 1,057	2,283	0,024
6	- 1,301	0,767	0
7	- 0,063	2,617	1,166
8 Br	2,490	0,169	1,411
9	1,848	0,561	- 0,956
10	0,016	- 1,225	0
11	1,913	2,931	0,105
12	- 0,075	4,461	1,701
13	0,045	1,875	- 1,871
14	0,055	3,619	- 1,366
15	- 1,975	2,900	- 0,031
16	- 0,169	1,503	2,726
17 Br	- 2,329	0,292	- 1,575
18	- 1,913	0,475	0,891

Angles (d°)			
2.1.6	118,97	17.6.5	109,37
1.2.3	109,96	17.6.1	109,81
2.3.4	104,75	10.1.6	121,27
i	4,26	12.7.3	113,98
i'	0,90	12.7.5	114,10
1.6.5	111,36	16.7.3	117,46
2.3.7	113,29	16.7.5	116,00
8.2.1	111,82	10.1.2	119,76
8.2.3	111,06	8.2.9	105,36
9.2.1	109,14	11.3.7	115,91
9.2.3	109,37	14.4.13	112,48
11.3.2	115,85	15.5.7	116,62
11.3.4	112,99	18.6.17	107,00
13.4.3	115,70	4.3.7	90,72
13.4.5	114,14	4.5.7	90,72
14.4.3	113,53	3.7.5	84,31
14.4.5	113,81	12.7.16	109,91
15.5.4	116,28	6.5.7	109,04
15.5.6	114,65	3.4.5	84,45
18.6.5	109,78	4.5.6	106,83
18.6.1	109,42		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	4,53	4.5.6.1	46,43
6.1.2.8	128,40	4.5.6.17	74,91
6.1.2.9	115,43	4.5.6.18	167,98
10.1.2.3	175,47	15.5.6.1	176,80
10.1.2.8	51,60	15.5.6.17	55,46
10.1.2.9	64,57	15.5.6.18	61,65
1.2.3.11	178,94	7.5.6.1	50,37
1.2.3.4	53,74	7.5.6.17	171,70
1.2.3.7	43,58	7.5.6.18	71,18
8.2.3.11	56,76	2.3.7.5	83,05
8.2.3.4	178,04	2.3.7.12	163,07
8.2.3.7	80,72	2.3.7.16	33,35
9.2.3.11	59,11	11.3.7.5	139,49
9.2.3.4	66,08	11.3.7.12	25,61
9.2.3.7	163,41	11.3.7.16	104,11
2.3.4.13	23,20	4.3.7.5	23,36
2.3.4.14	155,47	4.3.7.12	90,52
2.3.4.5	90,95	4.3.7.16	139,77
11.3.4.13	103,77	3.7.5.15	143,47
11.3.4.14	28,49	3.7.5.4	23,36
11.3.4.5	142,07	3.7.5.6	84,74
7.3.4.13	137,54	12.7.5.15	29,71
7.3.4.14	90,19	12.7.5.4	90,39
7.3.4.5	23,39	12.7.5.6	161,51
3.4.5.15	143,79	16.7.5.15	98,69
3.4.5.6	86,77	16.7.5.4	141,20
3.4.5.7	23,39	16.7.5.6	33,10
13.4.5.15	100,49	5.6.1.2	0,95
13.4.5.6	28,95	17.6.1.2	120,58
13.4.5.7	139,11	18.6.1.2	122,26
14.4.5.15	30,49	5.6.1.10	179,05
14.4.5.6	159,93	17.6.1.10	59,42
14.4.5.7	89,91	18.6.1.10	57,75

Energie (kcal/mole)	
Wa	9,664
Wb	63,111
Wd	8,277
Wdp . . .	8,222
ΣW	89,274
W_L	- 1,879
$\Sigma W+W_L$	87,394

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2'
ΔW	0,01 kcal

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1)
heptanone-3
αα' dibromée
isomère trans
(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)
28 variables
fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br_8	2,0
C - Br_{17}	2,1
μ_D	4,04D

FIGURE : 167

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,301	0,767	0
3	1,022	2,273	- 0,114
4	- 0,066	2,390	- 1,209
5	- 1,057	2,283	- 0,024
6	- 1,301	0,767	0
7	0,030	2,795	0,956
8 Br	2,370	0,373	1,570
9	1,922	0,437	- 0,872
10	0,016	- 1,225	0
11	1,904	2,914	- 0,310
12	0,051	4,702	1,175
13	- 0,121	1,557	- 1,913
14	- 0,080	3,362	- 1,708
15	- 1,976	2,898	- 0,096
16	0,068	1,957	2,683
17 Br	- 2,356	0,247	- 1,543
18	- 1,898	0,501	0,910

Angles (d°)			
2.1.6	118,97	17.6.5	109,37
1.2.3	109,96	17.6.1	109,81
2.3.4	104,75	10.1.6	121,27
i	4,26	12.7.3	113,98
i'	0,90	12.7.5	114,10
1.6.5	111,36	16.7.3	117,46
2.3.7	113,29	16.7.5	116,00
8.2.1	111,82	10.1.2	119,76
8.2.3	111,06	8.2.9	105,36
9.2.1	109,14	11.3.7	115,90
9.2.3	109,37	14.4.13	112,52
11.3.2	115,85	15.5.7	116,02
11.3.4	112,99	18.6.17	107,00
13.4.3	115,70	4.3.7	90,72
13.4.5	114,14	4.5.7	90,72
14.4.3	113,53	3.7.5	84,31
14.4.5	113,80	12.7.16	109,31
15.5.4	116,28	6.5.7	115,32
15.5.6	114,64	3.4.5	84,45
18.6.5	109,78	4.5.6	100,49
18.6.1	109,42		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	4,53	4.5.6.1	50,51
6.1.2.8	119,33	4.5.6.17	70,83
6.1.2.9	124,50	4.5.6.18	172,06
10.1.2.3	175,47	15.5.6.1	175,99
10.1.2.8	60,67	15.5.6.17	54,65
10.1.2.9	55,50	15.5.6.18	62,46
1.2.3.11	169,18	7.5.6.1	45,33
1.2.3.4	43,98	7.5.6.17	166,67
1.2.3.7	53,34	7.5.6.18	76,22
8.2.3.11	66,52	2.3.7.5	83,05
8.2.3.4	168,29	2.3.7.12	163,07
8.2.3.7	70,96	2.3.7.16	33,35
9.2.3.11	49,35	11.3.7.5	139,49
9.2.3.4	75,84	11.3.7.12	25,61
9.2.3.7	173,17	11.3.7.16	104,11
2.3.4.13	23,19	4.3.7.5	23,36
2.3.4.14	155,48	4.3.7.12	90,52
2.3.4.5	90,95	4.3.7.16	139,77
11.3.4.13	103,79	3.7.5.15	143,29
11.3.4.14	28,50	3.7.5.4	23,36
11.3.4.5	142,07	3.7.5.6	78,61
7.3.4.13	137,53	12.7.5.15	29,53
7.3.4.14	90,18	12.7.5.4	90,39
7.3.4.5	23,39	12.7.5.6	167,64
3.4.5.15	143,10	16.7.5.15	98,87
3.4.5.6	92,54	16.7.5.4	141,20
3.4.5.7	23,39	16.7.5.6	39,23
13.4.5.15	101,20	5.6.1.2	0,95
13.4.5.6	23,16	17.6.1.2	122,51
13.4.5.7	139,10	18.6.1.2	120,33
14.4.5.15	29,80	5.6.1.10	179,05
14.4.5.6	154,16	17.6.1.10	57,49
14.4.5.7	89,90	18.6.1.10	59,67

Energie (kcal/mole)	
Wa	11,229
Wb	65,577
Wd	8,358
Wdp . . .	7,684
ΣW	92,847
W_L	- 2,364
$\Sigma W+W_L$	90,483

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2'
ΔW	0,2 kcal

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1)
heptanone-3
αα' dibromée
isomère trans
(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)
28 variables
fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br_8	2,1
C - Br_{17}	2,0
μ_D	3,77D

FIGURE : 168

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,300	0,769	0
3	1,035	2,274	0,154
4	- 0,009	2,642	- 0,928
5	- 1,046	2,275	0,162
6	- 1,300	0,769	0
7	0	2,566	1,269
8	1,968	0,399	0,819
9	1,844	0,578	- 0,960
10	0,006	- 1,225	0
11	1,929	2,928	0,138
12	0,007	4,393	1,859
13	- 0,014	1,998	- 1,810
14	- 0,017	3,704	- 1,180
15	- 1,965	2,892	0,183
16	0,035	1,402	2,796
17	- 1,833	0,599	- 0,970
18 Br	- 2,510	0,093	1,357

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1)

heptanone-3

α bromée (brome équatorial)

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

28 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	2,0

Angles (d°)			
2.1.6	118,80	17.6.5	111,76
1.2.3	110,53	17.6.1	111,08
2.3.4	106,21	10.1.6	120,87
i	5,74	12.7.3	113,44
i'	6,07	12.7.5	113,63
1.6.5	110,90	16.7.3	116,48
2.3.7	111,81	16.7.5	117,79
8.2.1	110,22	10.1.2	120,33
8.2.3	110,65	8.2.9	106,33
9.2.1	109,38	11.3.7	116,00
9.2.3	109,63	14.4.13	112,72
11.3.2	116,01	15.5.7	116,24
11.3.4	113,22	18.6.17	104,83
13.4.3	115,29	4.3.7	90,39
13.4.5	115,21	4.5.7	90,39
14.4.3	113,43	3.7.5	84,34
14.4.5	112,90	12.7.16	109,41
15.5.4	115,88	6.5.7	111,79
15.5.6	114,26	3.4.5	84,47
18.6.5	106,60	4.5.6	105,60
18.6.1	109,45		

Energie (kcal/mole)	
Wa	9,868
Wb	63,316
Wd	8,011
Wdp . . .	4,018
ΣW	85,214
W_L	- 0,599
$\Sigma W+W_L$	84,615

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	$5\ 10^{-3}$ kcal

Dièdres (radian)			
6.1.2.3	0,107	4.5.6.1	0,911
6.1.2.8	2,247	4.5.6.17	1,119
6.1.2.9	2,001	4.5.6.18	3,085
10.1.2.3	3,035	15.5.6.1	3,129
10.1.2.8	0,894	15.5.6.17	1,055
10.1.2.9	1,140	15.5.6.18	0,955
1.2.3.11	3,114	7.5.6.1	0,779
1.2.3.4	0,901	7.5.6.17	2,879
1.2.3.7	0,794	7.5.6.18	1,394
8.2.3.11	1,033	2.3.7.5	1,459
8.2.3.4	3,037	2.3.7.12	2,846
8.2.3.7	1,342	2.3.7.16	0,605
9.2.3.11	1,008	11.3.7.5	2,448
9.2.3.4	1,204	11.3.7.12	0,470
9.2.3.7	2,899	11.3.7.16	1,770
2.3.4.13	0,463	4.3.7.5	0,420
2.3.4.14	2,768	4.3.7.12	1,558
2.3.4.5	1,550	4.3.7.16	2,485
11.3.4.13	1,779	3.7.5.15	2,503
11.3.4.14	0,526	3.7.5.4	0,420
11.3.4.5	2,492	3.7.5.6	1,448
7.3.4.13	2,433	12.7.5.15	0,528
7.3.4.14	1,545	12.7.5.4	1,555
7.3.4.5	0,420	12.7.5.6	2,861
3.4.5.15	2,509	16.7.5.15	1,738
3.4.5.6	1,548	16.7.5.4	2,462
3.4.5.7	0,420	16.7.5.6	0,595
13.4.5.15	1,761	5.6.1.2	0,113
13.4.5.6	0,466	17.6.1.2	1,978
13.4.5.7	2,434	18.6.1.2	3,294
14.4.5.15	0,534	5.6.1.10	3,028
14.4.5.6	2,760	17.6.1.10	1,164
14.4.5.7	1,554	18.6.1.10	0,848

FIGURE : 169

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,301	0,767	0
3	1,036	2,277	- 0,106
4	- 0,046	2,431	- 1,202
5	- 1,051	2,282	- 0,033
6	- 1,301	0,767	0
7	0,030	2,791	0,954
8	1,922	0,530	0,901
9	1,920	0,437	- 0,872
10	0,013	- 1,225	0
11	1,928	2,910	- 0,286
12	0,046	4,698	1,180
13	- 0,084	1,606	- 1,917
14	- 0,057	3,416	- 1,673
15	- 1,969	2,900	- 0,096
16	- 0,061	1,953	2,681
17	- 1,913	0,465	- 0,887
18 Br	- 2,340	0,312	1,573

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1)

heptanone-3

α bromée (Br axial)

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

28 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	3,0
C - Br	2,1
μ_D	4,037D

Angles (d°)			
2.1.6	118,92	17.6.5	109,65
1.2.3	110,57	17.6.1	110,02
2.3.4	105,49	10.1.6	121,16
i	3,97	12.7.3	113,89
i'	1,23	12.7.5	114,01
1.6.5	111,17	16.7.3	117,40
2.3.7	112,99	16.7.5	116,16
8.2.1	111,75	10.1.2	119,92
8.2.3	111,05	8.2.9	104,87
9.2.1	109,08	11.3.7	116,30
9.2.3	109,33	14.4.13	113,47
11.3.2	115,76	15.5.7	115,52
11.3.4	113,04	18.6.17	106,61
13.4.3	114,36	4.3.7	89,83
13.4.5	113,57	4.5.7	89,83
14.4.3	113,70	3.7.5	84,70
14.4.5	113,93	12.7.16	109,12
15.5.4	116,19	6.5.7	115,07
15.5.6	114,58	3.4.5	84,84
18.6.5	109,79	4.5.6	102,49
18.6.1	109,50		

Energie (kcal/mole)	
Wa	10,093
Wb	65,006
Wd	8,173
Wdp . . .	4,125
ΣW	87,397
W_L	- 0,609
$\Sigma W+W_L$	86,788

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	0,1 kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	4,24	4.5.6.1	49,76
6.1.2.8	120,01	4.5.6.17	71,56
6.1.2.9	124,50	4.5.6.18	171,63
10.1.2.3	175,76	15.5.6.1	176,52
10.1.2.8	59,99	15.5.6.17	55,20
10.1.2.9	55,50	15.5.6.18	61,61
1.2.3.11	170,08	7.5.6.1	46,00
1.2.3.4	44,30	7.5.6.17	167,32
1.2.3.7	52,26	7.5.6.18	75,87
8.2.3.11	65,27	2.3.7.5	82,31
8.2.3.4	168,95	2.3.7.12	163,75
8.2.3.7	72,39	2.3.7.16	34,47
9.2.3.11	49,97	11.3.7.5	140,28
9.2.3.4	75,81	11.3.7.12	26,33
9.2.3.7	172,37	11.3.7.16	102,94
2.3.4.13	24,21	4.3.7.5	24,48
2.3.4.14	156,75	4.3.7.12	89,47
2.3.4.5	89,35	4.3.7.16	141,26
11.3.4.13	103,23	3.7.5.15	143,67
11.3.4.14	29,31	3.7.5.4	24,48
11.3.4.5	143,21	3.7.5.6	79,25
7.3.4.13	138,07	12.7.5.15	29,84
7.3.4.14	89,39	12.7.5.4	89,34
7.3.4.5	24,51	12.7.5.6	166,92
3.4.5.15	143,11	16.7.5.15	98,34
3.4.5.6	91,17	16.7.5.4	142,48
3.4.5.7	24,51	16.7.5.6	38,74
13.4.5.15	102,54	5.6.1.2	1,32
13.4.5.6	23,18	17.6.1.2	122,8
13.4.5.7	138,86	18.6.1.2	120,34
14.4.5.15	29,45	5.6.1.10	178,69
14.4.5.6	155,16	17.6.1.10	57,19
14.4.5.7	89,16	18.6.1.10	59,66

FIGURE : 170

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,303	0,762	0
3	1,040	2,269	0,145
4	0,066	2,572	- 1,019
5	- 1,036	2,275	0,026
6	- 1,303	0,762	0
7	- 0,060	2,609	1,183
8	1,960	0,396	0,830
9	1,855	0,564	- 0,955
10	0,001	- 1,225	0
11	1,937	2,918	0,147
12	- 0,071	4,456	1,707
13	0,096	1,841	- 1,830
14	0,092	3,622	- 1,318
15	- 1,946	2,903	- 0,045
16	- 0,158	1,473	2,728
17 Br	- 2,326	0,296	- 1,582
18	- 1,925	0,480	0,888

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1)

heptanone-3

α bromée (Br axial)

(cycle hexagonal gem-diméthylé bateau)

28 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	3,0
C - Br	2,1
μ_D	4,054D

Angles (d°)			
2.1.6	119,35	17.6.5	109,33
1.2.3	110,31	17.6.1	110,58
2.3.4	103,24	10.1.6	120,35
i	5,42	12.7.3	113,44
i'	0,98	12.7.5	114,04
1.6.5	110,31	16.7.3	116,46
2.3.7	113,58	16.7.5	116,17
8.2.1	109,92	10.1.2	120,30
8.2.3	110,56	8.2.9	106,59
9.2.1	109,60	11.3.7	116,46
9.2.3	109,79	14.4.13	116,09
11.3.2	115,84	15.5.7	116,28
11.3.4	113,32	18.6.17	107,08
13.4.3	114,20	4.3.7	90,81
13.4.5	113,12	4.5.7	90,81
14.4.3	112,29	3.7.5	84,26
14.4.5	112,71	12.7.16	110,42
15.5.4	115,63	6.5.7	109,52
15.5.6	114,50	3.4.5	84,40
18.6.5	110,01	4.5.6	107,53
18.6.1	109,48		

Energie (kcal/mole)	
Wa	9,074
Wb	62,910
Wd	8,318
Wdp . . .	4,063
ΣW	84,364
W_L	- 1,324
$\Sigma W+W_L$	83,040

$\Delta\theta_{2.1.6}$	10'
ΔW	0,1 kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	5,78	4.5.6.1	45,90
6.1.2.8	127,95	4.5.6.17	74,97
6.1.2.9	115,22	4.5.6.18	167,71
10.1.2.3	174,22	15.5.6.1	175,89
10.1.2.8	52,05	15.5.6.17	55,01
10.1.2.9	64,78	15.5.6.18	62,30
1.2.3.11	179,48	7.5.6.1	51,44
1.2.3.4	55,00	7.5.6.17	172,32
1.2.3.7	41,81	7.5.6.18	70,37
8.2.3.11	58,75	2.3.7.5	81,58
8.2.3.4	176,79	2.3.7.12	164,69
8.2.3.7	79,98	2.3.7.16	34,86
9.2.3.11	58,58	11.3.7.5	139,96
9.2.3.4	65,88	11.3.7.12	26,22
9.2.3.7	162,70	11.3.7.16	103,60
2.3.4.13	21,67	4.3.7.5	23,26
2.3.4.14	156,53	4.3.7.12	90,48
2.3.4.5	91,19	4.3.7.16	139,70
11.3.4.13	104,42	3.7.5.15	142,57
11.3.4.14	30,44	3.7.5.4	23,26
11.3.4.5	142,72	3.7.5.6	85,68
7.3.4.13	136,15	12.7.5.15	29,43
7.3.4.14	88,99	12.7.5.4	89,88
7.3.4.5	23,29	12.7.5.6	161,18
3.4.5.15	143,15	16.7.5.15	100,71
3.4.5.6	87,50	16.7.5.4	139,98
3.4.5.7	23,29	16.7.5.6	31,03
13.4.5.15	102,89	5.6.1.2	1,04
13.4.5.6	26,45	17.6.1.2	120,15
13.4.5.7	137,25	18.6.1.2	122,11
14.4.5.15	31,30	5.6.1.10	178,97
14.4.5.6	160,65	17.6.1.10	59,85
14.4.5.7	88,56	18.6.1.10	57,89

FIGURE : 171

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,303	0,763	0
3	1,024	2,272	- 0,065
4	- 0,022	2,403	- 1,199
5	- 1,055	2,278	- 0,052
6	- 1,303	0,763	0
7	- 0,008	2,718	1,002
8	1,951	0,477	0,867
9	1,901	0,471	- 0,901
10	- 0,004	- 1,225	0
11	1,926	2,902	- 0,194
12	- 0,001	4,595	1,404
13	- 0,068	1,527	- 1,850
14	- 0,048	3,412	- 1,615
15	- 1,967	2,892	- 0,190
16	- 0,016	1,724	2,645
17 Br	- 2,513	0,137	- 1,381
18	- 1,847	0,540	0,953

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1)

heptanone-3

α bromée (Br équatorial)

(cycle hexagonal gem-diméthylé chaise)

28 variables

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	2,0
μ_D	4,022D

Angles (d°)			
2.1.6	119,30	17.6.5	107,68
1.2.3	109,86	17.6.1	108,56
2.3.4	103,70	10.1.6	120,19
i	2,44	12.7.3	115,03
i'	1,94	12.7.5	114,97
1.6.5	111,04	16.7.3	116,33
2.3.7	111,97	16.7.5	115,60
8.2.1	111,74	10.1.2	120,51
8.2.3	112,89	8.2.9	104,31
9.2.1	109,22	11.3.7	117,29
9.2.3	108,59	14.4.13	120,79
11.3.2	114,56	15.5.7	118,92
11.3.4	114,67	18.6.17	103,84
13.4.3	113,42	4.3.7	91,71
13.4.5	110,46	4.5.7	91,71
14.4.3	111,90	3.7.5	84,25
14.4.5	109,97	12.7.16	109,08
15.5.4	114,35	6.5.7	111,47
15.5.6	114,71	3.4.5	84,38
18.6.5	113,25	4.5.6	102,25
18.6.1	112,03		

Energie (kcal/mole)	
Wa	9,123
Wb	65,158
Wd	8,766
Wdp . . .	4,064
ΣW	87,112
W_L	- 1,350
$\Sigma W+W_L$	85,762

$\Delta\theta_{2.1.6}$	1"
ΔW	0,1 kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	2,59	4.5.6.1	47,92
6.1.2.8	123,51	4.5.6.17	79,15
6.1.2.9	121,60	4.5.6.18	166,64
10.1.2.3	177,41	15.5.6.1	172,28
10.1.2.8	56,49	15.5.6.17	45,21
10.1.2.9	58,40	15.5.6.18	69,00
1.2.3.11	172,88	7.5.6.1	48,87
1.2.3.4	47,17	7.5.6.17	175,94
1.2.3.7	50,39	7.5.6.18	69,85
8.2.3.11	61,66	2.3.7.5	84,42
8.2.3.4	172,62	2.3.7.12	160,66
8.2.3.7	75,06	2.3.7.16	31,34
9.2.3.11	53,49	11.3.7.5	140,13
9.2.3.4	72,23	11.3.7.12	25,21
9.2.3.7	169,78	11.3.7.16	104,11
2.3.4.13	178,87	4.3.7.5	21,09
2.3.4.14	158,72	4.3.7.12	93,82
2.3.4.5	92,00	4.3.7.16	136,86
11.3.4.13	107,76	3.7.5.15	140,28
11.3.4.14	33,07	3.7.5.4	21,09
11.3.4.5	142,36	3.7.5.6	82,79
7.3.4.13	131,00	12.7.5.15	25,32
7.3.4.14	88,16	12.7.5.4	93,87
7.3.4.5	21,12	12.7.5.6	162,25
3.4.5.15	144,11	16.7.5.15	103,22
3.4.5.6	91,29	16.7.5.4	137,59
3.4.5.7	21,12	16.7.5.6	33,71
13.4.5.15	102,96	5.6.1.2	2,08
13.4.5.6	21,64	17.6.1.2	129,82
13.4.5.7	134,04	18.6.1.2	116,10
14.4.5.15	32,83	5.6.1.10	177,92
14.4.5.6	157,43	17.6.1.10	50,18
14.4.5.7	90,16	18.6.1.10	63,90

FIGURE : 172

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,260	0,871	0
3	1,013	2,150	0,814
4	0	3,073	0,095
5	- 1,013	2,150	0,814
6	- 1,260	0,871	0
7	0	1,892	1,834
8	0	4,873	0,764
9	0	3,148	- 1,823
10	2,119	0,300	0,438
11	1,617	1,095	- 1,038
12	1,966	2,651	1,076
13	- 1,966	2,651	1,076
14	0	2,623	2,645
15	0	0,952	2,389
16	- 2,119	0,300	0,438
17	- 1,617	1,095	- 1,038
18	0	- 0,994	- 1,009
19	0	- 0,730	0,849
20	0,626	- 0,602	- 1,611

Angles (d°)	
2.1.6	110,70
1.2.3	109,95
2.3.4	110,83
3.4.5	81,80
1.2.10	109,91
1.2.11	112,07
12.3.4	113,80
3.4.8	113,39
3.4.9	119,16
3.7.14	107,34
3.7.15	113,49
2.1.18	111,75
2.1.19	113,50
2.1.7	108,36
1.18.20	99,33

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	75,54
18.1.2.11	37,97
6.1.2.3	34,32
19.1.2.3	90,96
19.1.2.11	143,68
19.1.2.10	30,17
20.18.1.19	138,24
10.2.3.7	93,56
10.2.3.4	170,30
10.2.3.12	42,56
11.2.3.7	152,92
11.2.3.4	56,79
1.2.3.12	163,69

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	15,539
Wb . .	68,364
Wd . .	11,090
ΣW . .	94,994

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanol-3

isomère cis

16 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-4,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

Me---C $0,11e^{3,76(3,85-r)}$

fonctions : O---H, Me---O, O---C du tableau 8

FIGURE : 173

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,279	0,843	0
3	0,979	2,292	0,409
4	0	2,793	- 0,680
5	0,979	2,292	0,409
6	- 1,279	0,843	0
7	0	2,297	1,378
8	0	4,695	- 0,941
9	0	2,027	- 2,441
10	1,973	0,409	0,765
11	1,922	0,730	- 0,911
12	1,981	2,765	0,400
13	1,981	2,765	0,400
14	0	2,972	2,236
15	0	1,303	1,860
16	- 1,973	0,409	0,765
17	- 1,922	0,730	- 0,911
18	0	- 0,892	- 1,100
19	0	- 0,721	0,857
20	0,630	- 1,514	- 0,750

Angles (d°)	
2.1.6	113,26
1.2.3	110,82
2.3.4	103,98
3.4.5	78,45
1.2.10	107,72
1.2.11	115,05
12.3.4.	115,33
3.4.8	114,59
3.4.9	121,08
3.7.14	110,08
3.7.15	117,27
2.1.18	110,74
2.1.19	110,27
2.1.7	107,03
1.18.20	97,21

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	101,71
18.1.2.11	7,98
6.1.2.3	16,56
19.1.2.3	108,55
19.1.2.11	118,74
19.1.2.10	9,06
20.18.1.19	41,82
10.2.3.7	
10.2.3.4	178,61
10.2.3.12	60,51
1.2.3.4	71,43
11.2.3.7	169,22
1.2.3.12	178,03
10.2.3.7	81,08

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	14,144
Wb . .	65,355
Wd . .	22,599
ΣW . .	102,098

diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanol-3

isomère cis

16 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-4,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

Me---C $0,11e^{3,76(3,85-r)}$

fonctions : O---H, Me---O, O---C du tableau 8

FIGURE : 174

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,283	0,838	0
3	0,988	2,257	0,505
4	0	2,855	- 0,523
5	- 0,988	2,257	0,505
6	- 1,283	0,838	0
7	0	2,112	1,484
8	0	4,771	- 0,643
9	0	2,317	- 2,366
10	1,997	0,362	0,719
11	1,908	0,772	- 0,927
12	2,000	2,707	0,534
13	- 2,000	2,707	0,534
14	0	2,859	2,363
15	0	1,220	1,930
16	- 1,997	0,362	0,719
17	- 1,908	0,772	0,927
18	0	- 0,996	1,006
19	0	- 0,679	- 0,891
20	0,606	- 1,593	0,578

Angles (d°)	
2.1.6	113,70
1.2.3	110,14
2.3.4	105,02
3.4.5	79,29
1.2.10	107,50
1.2.11	115,80
12.3.4	116,20
3.4.8	115,29
3.4.9	122,08
3.7.14	110,45
3.7.15	118,07
2.1.18	112,62
2.1.19	109,34
2.1.7	107,67
1.18.20	96,95

Dièdres (d°)	
18.1.2.10	7,98
18.1.2.11	117,16
6.1.2.3	20,63
19.1.2.3	143,16
19.1.2.11	9,33
19.1.2.10	99,85
20.18.1.19	39,88
10.2.3.7	82,72
10.2.3.4	179,96
10.2.3.12	58,43
1.2.3.7	34,28
1.2.3.4	62,96
11.2.3.7	168,08
11.2.3.4	70,86
11.2.3.12	50,75

Energie (Kcal/mole)	
Wa . . .	16,500
Wb . . .	67,182
Wd . . .	14,592
ΣW . . .	98,274

<u>diméthyl-6,6 bicyclo (3.1.1) heptanol-3</u>

isomère trans

16 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-4,63r} - 325/r^6$

C--- H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

fonctions :

O---H, Me---O, O---C du tableau 8

<u>FIGURE</u> : 175

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,263	0,868	0
3	1,035	2,169	0,784
4	0	3,079	0,080
5	- 1,035	2,169	0,784
6	- 1,263	0,868	0
7	0	1,879	1,901
8	0	4,864	0,787
9	0	3,239	1,834
10 Me	2,811	- 0,092	0,606
11	1,540	1,117	- 1,056
12	1,955	2,684	1,124
13	- 1,955	2,684	1,124
14	0	2,646	2,679
15	0	0,884	2,352
16 Me	- 2,811	- 0,092	0,606
17	- 1,540	1,117	- 1,056
18	0	- 0,857	1,127
19	0	- 0,693	- 0,880
20	0,604	- 1,531	0,831

Angles (d°)	
2.1.6	111,00
1.2.3	110,94
2.3.4	111,39
3.4.5	83,91
1.2.10	112,44
1.2.11	109,26
12.3.4	114,87
3.4.8	112,28
3.4.9	120,17
3.7.14	112,46
3.7.15	117,85
2.1.18	110,51
2.1.19	110,04
2.1.7	107,98
1.18.20	100,42

Dièdres (d°)			
18.1.2.3	88,92	12.3.4.9	94,02
18.1.2.11	150,53	7.3.4.8	84,51
18.1.2.10	37,97	7.3.4.5	27,10
6.1.2.3	33,14	7.3.4.9	148,61
6.1.2.11	167,79	2.3.4.8	166,32
6.1.2.10	160,03	2.3.4.5	82,06
19.1.2.3	156,13	2.3.4.9	39,45
19.1.2.11	35,60	4.3.7.14	84,69
19.1.2.10	76,97	4.3.7.15	145,36
10.2.3.7	96,52	4.3.7.5	27,07
10.2.3.4	166,72	12.3.7.14	32,68
10.2.3.12	33,48	12.3.7.15	97,26
1.2.3.7	30,37	12.3.7.5	144,44
1.2.3.4	66,39	2.3.7.14	162,92
1.2.3.12	160,36	2.3.7.15	32,99
11.2.3.7	150,90	2.3.7.5	85,31
11.2.3.4	54,15	20.18.1.2	78,52
11.2.3.12	79,09	20.18.1.6	158,84
12.3.4.8	32,86	20.18.1.19	40,17
12.3.4.5	144,47		

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	25,471
Wb . .	69,766
Wd . .	10,359
W . .	105,596

tétraméthyl-2,4,6,6 bicyclo (3.1.1) heptanol-3

isomère trans

16 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-4,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

Me---C $0,11e^{3,76(3,85-r)}$

O---H, Me---O, O---C du tableau 8

FIGURE : 176

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,281	0,840	0
3	1,041	2,181	0,708
4	0	3,030	- 0,062
5	- 1,041	2,181	0,708
6	- 1,281	0,840	0
7	0	1,978	1,839
8	0	4,877	0,462
9	0	2,957	- 1,980
10	2,054	0,280	0,587
11 Me	2,082	1,020	- 1,736
12	1,965	2,716	1,004
13	- 1,965	2,716	1,004
14	0	2,804	2,553
15	0	1,033	2,385
16	- 2,054	0,280	0,587
17 Me	- 2,082	1,020	- 1,736
18	0	- 1,226	- 0,708
19	0	- 0,595	0,949
20	0,572	- 1,013	- 1,438

Angles (d°)	
2.1.6	113,54
1.2.3	110,34
2.3.4	110,79
3.4.5	84,51
1.2.10	107,63
1.2.11	113,58
12.3.4	115,39
3.4.8	113,07
3.4.9	118,43
3.7.14	112,22
3.7.15	118,57
2.1.18	106,92
2.1.19	118,32
2.1.7	109,09
1.18.20	100,92

Dièdres (d°)			
18.1.2.3	174,82	7.3.4.8	85,87
18.1.2.11	45,97	7.3.4.5	26,89
18.1.2.10	68,00	7.3.4.9	146,35
6.1.2.3	29,45	2.3.4.8	164,04
6.1.2.11	100,49	2.3.4.5	83,19
6.1.2.10	146,63	2.3.4.9	36,27
19.1.2.3	88,23	4.3.7.14	84,87
19.1.2.11	142,91	4.3.7.15	146,44
19.1.2.10	28,95	4.3.7.5	26,86
10.2.3.7	84,67	12.3.7.14	32,95
10.2.3.4	178,90	12.3.7.15	95,73
10.2.3.12	46,33	12.3.7.5	144,68
1.2.3.7	32,52	2.3.7.14	163,43
1.2.3.4	63,91	2.3.7.15	34,74
1.2.3.12	163,50	2.3.7.5	84,84
11.2.3.7	161,37	20.18.1.2	34,09
11.2.3.4	64,94	20.18.1.6	109,62
11.2.3.12	67,64	20.18.1.19	142,23
12.3.4.8	31,95		
12.3.4.5	144,71		
12.3.4.9	95,82		

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	25,355
Wb . .	74,449
Wd . .	10,236
W . .	110,040

tétraméthyl-2,4,6,6 bicyclo (3.1.1) heptanol-3

isomère cis

16 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-4,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

Me---C $0,11e^{3,76(3,85-r)}$

O---H, Me---O, O---C du tableau 8

FIGURE : 177

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,283	0,838	0
3	0,988	2,257	0,509
4	0	2,855	- 0,522
5	- 0,988	2,257	0,509
6	- 1,283	0,838	0
7	0	2,135	1,697
8	0	4,771	- 0,642
9	0	2,318	- 2,366
10	1,997	0,362	0,719
11 Me	2,354	0,726	- 1,589
12	1,911	2,840	0,697
13	- 1,911	2,840	0,697
14	0	3,053	2,289
15	0	1,207	2,272
16	- 1,997	0,362	0,719
17 Me	- 2,354	0,726	- 1,589
18	0	- 0,858	1,127
19	0	- 0,788	- 0,796
20	0,606	- 1,505	0,779

Angles (d°)	
2.1.6	113,69
1.2.3	110,14
2.3.4	105,01
3.4.5	79,29
1.2.10	107,58
1.2.11	115,80
12.3.4	116,20
3.4.8	115,29
3.4.9	122,08
3.7.14	110,44
3.7.15	118,07
2.1.18	112,62
2.1.19	109,34
2.1.7	107,67
1.18.20	96,94

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	23,401
Wb . .	78,618
Wd . .	13,802
ΣW . .	115,821

Dièdres (d°)			
18.1.2.3	101,87	12.3.4.9	95,77
18.1.2.11	124,21	7.3.4.8	94,41
18.1.2.10	15,12	7.3.4.5	186,44
6.1.2.3	20,65	7.3.4.9	139,93
6.1.2.11	179,92	2.3.4.8	154,88
6.1.2.10	137,63	2.3.4.5	92,06
19.1.2.3	150,28	2.3.4.9	29,23
19.1.2.11	16,48	4.3.7.14	89,33
19.1.2.10	92,72	4.3.7.15	134,79
10.2.3.7	76,57	4.3.7.5	18,63
10.2.3.4	179,91	12.3.7.14	34,96
10.2.3.12	52,74	12.3.7.15	100,91
1.2.3.7	40,42	12.3.7.5	142,91
1.2.3.4	62,97	2.3.7.14	162,15
1.2.3.12	169,73	2.3.7.15	26,27
11.2.3.7	174,23	2.3.7.5	89,90
11.2.3.4	70,84	20.18.1.2	77,59
11.2.3.12	56,46	20.18.1.6	157,32
12.3.4.8	29,88	20.18.1.19	39,86
12.3.4.5	142,93		

tétraméthyl-2,4,6,6 bicyclo (3.1.1) heptanol-3

isomère trans

16 variables

fonctions :

C---C $16600e^{-4,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

Me---C $o,11e^{3,76(3,85-r)}$

O---H, Me---O, O---C du tableau 8

FIGURE : 178

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,274	0,851	0
3	1,137	2,016	0,991
4	- 0,019	2,934	0,556
5	- 1,205	2,042	0,967
6	- 1,274	0,851	0
7	2,126	0,235	0,268
8	1,456	1,238	- 0,997
9	0,708	1,453	2,358
10	2,088	2,577	1,081
11	- 0,014	3,879	1,096
12	- 0,005	3,150	- 0,511
13	- 0,827	1,521	2,364
14	- 2,156	2,610	0,978
15	- 2,123	0,226	0,258
16	- 1,463	1,218	- 1,003
17	1,132	2,048	3,165
18	1,068	0,436	2,507
19	- 1,191	2,189	3,143
20	- 1,268	0,542	2,545
21	- 0,001	- 0,667	0,900
22	0	- 0,673	- 0,896

bicyclo (3.2.1) octane

37 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	112,54	17.9.3	110,50
1.2.3	110,30	17.9.13	111,02
2.3.4	109,69	18.9.3	111,73
i	40,19	18.9.13	111,57
i'	38,99	19.13.5	111,26
1.6.5	113,15	19.13.9	111,16
7.2.1	109,75	20.13.5	111,09
7.2.3	109,97	20.13.9	111,23
8.2.1	109,72	21.1.6	109,24
8.2.3	109,69	21.1.2	109,37
9.3.2	108,70	22.1.6	109,48
9.3.4	105,06	22.1.2	109,48
10.3.2	111,07	3.9.13	105,44
10.3.4	111,47	5.13.9	104,86
11.4.3	111,94	3.4.5	99,07
11.4.5	111,99	4.5.6	108,44
12.4.3	112,73	13.5.4	104,46
12.4.5	112,74	9.3.10	110,65
13.5.6	108,64	13.5.14	112,03
14.5.4	111,57	7.2.8	107,36
14.5.6	111,41	11.4.12	108,27
15.6.5	109,42	15.6.16	106,19
15.6.1	109,34	17.9.18	106,25
16.6.5	109,09	19.13.20	107,30
16.6.1	109,42	21.1.22	106,56

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	2,019
Wb . . .	9,558
Wd . . .	7,880
ΣW . . .	19,456

$\Delta\theta_{2.1.6}$	1'
ΔW	10^{-3} kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	43,48	14.5.6.1	177,39
6.1.2.7	164,79	14.5.6.15	55,21
6.1.2.8	77,47	14.5.6.16	60,57
21.1.2.3	78,13	2.3.9.13	92,51
21.1.2.7	43,19	2.3.9.17	147,21
21.1.2.8	160,93	2.3.9.18	29,12
22.1.2.3	165,47	4.3.9.13	24,85
22.1.2.7	73,22	4.3.9.17	95,44
22.1.2.8	44,52	4.3.9.18	146,48
1.2.3.4	62,30	10.3.9.13	145,28
1.2.3.9	52,07	10.3.9.17	24,99
1.2.3.10	174,03	10.3.9.18	93,09
7.2.3.4	176,52	6.5.13.9	85,41
7.2.3.9	69,11	6.5.13.19	154,19
7.2.3.10	52,85	6.5.13.20	34,99
8.2.3.4	58,66	4.5.13.9	30,17
8.2.3.9	173,03	4.5.13.19	90,23
8.2.3.10	65,01	4.5.13.20	150,57
2.3.4.11	167,47	14.5.13.9	151,09
2.3.4.12	45,11	14.5.13.19	30,68
9.3.4.11	75,86	14.5.13.20	88,51
9.3.4.12	161,79	5.13.9.3	3,23
10.3.4.11	44,03	5.13.9.17	123,04
10.2.3.12	78,32	5.13.9.18	118,37
3.4.5.6	71,29	19.13.9.3	116,96
3.4.5.13	44,43	19.13.9.17	2,85
3.4.5.14	165,65	19.13.9.18	121,44
11.4.5.6	170,52	20.13.9.3	123,25
11.4.5.13	73,76	20.13.9.17	116,95
11.4.5.14	47,46	20.13.9.18	1,64
12.4.5.6	48,13	5.6.1.2	43,18
12.4.5.13	163,84	15.6.1.2	165,41
12.4.5.14	74,93	16.6.1.2	78,67
4.5.6.1	59,45	5.6.1.21	78,49
4.5.6.15	178,37	15.6.1.21	43,73
4.5.6.16	62,59	16.6.1.21	159,65
13.5.6.1	53,52	5.6.1.22	165,17
13.5.6.15	68,67	15.6.1.22	72,60
13.5.6.16	175,56	16.6.1.22	43,32

FIGURE : 179

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,271	0,856	0
3	1,170	2,020	- 0,996
4	- 0,014	1,782	- 1,950
5	- 1,152	2,057	- 0,950
6	- 1,271	0,856	0
7	1,469	1,245	1,031
8	2,156	0,218	- 0,251
9	0,825	3,311	- 0,232
10	2,119	2,153	- 1,554
11	- 0,049	0,761	- 2,327
12	- 0,020	2,479	- 2,786
13	- 0,71	3,296	- 0,153
14	- 2,110	2,263	- 1,467
15	- 1,476	1,219	1,040
16	- 2,142	0,225	- 0,311
17	1,271	3,300	0,761
18	1,187	4,193	- 0,758
19	- 1,055	3,245	0,879
20	- 1,136	4,204	- 0,578
21	- 0,001	- 0,667	0,900
22	0	- 0,675	- 0,894

bicyclo (3.2.1) octane

37 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	112,08	17.9.3	110,65
1.2.3	111,67	17.9.13	111,02
2.3.4	109,56	18.9.3	111,37
i	40,45	18.9.13	111,20
i'	38,23	19.13.5	111,44
1.6.5	111,87	19.13.9	111,24
7.2.1	109,92	20.13.5	111,09
7.2.3	110,24	20.13.9	111,12
8.2.1	109,72	21.1.6	109,42
8.2.3	109,78	21.1.2	109,47
9.3.2	109,15	22.1.6	109,67
9.3.4	105,35	22.1.2	109,67
10.3.2	111,15	3.9.13	104,01
10.3.4	111,46	5.13.9	105,55
11.4.3	112,58	3.4.5	97,99
11.4.5	111,63	4.5.6	108,63
12.4.3	112,38	13.5.4	105,52
12.4.5	112,38	9.3.10	110,00
13.5.6	109,35	13.5.14	109,86
14.5.4	111,73	7.2.8	105,33
14.5.6	111,55	11.4.12	109,52
15.6.5	109,59	15.6.16	107,31
15.6.1	109,43	17.9.18	108,17
16.6.5	109,18	19.13.20	106,50
16.6.1	109,33	21.1.22	106,38

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	3,978
Wb . . .	9,587
Wd . . .	12,100
ΣW . . .	25,665

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2'
ΔW	0,1 kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	41,28	14.5.6.1	142,50
6.1.2.7	78,40	14.5.6.15	95,93
6.1.2.8	166,23	14.5.6.16	21,35
21.1.2.3	165,86	2.3.9.13	86,59
21.1.2.7	43,19	2.3.9.17	32,94
21.1.2.8	72,19	2.3.9.18	153,30
22.1.2.3	77,78	4.3.9.13	30,98
22.1.2.7	159,55	4.3.9.17	150,51
22.1.2.8	44,17	4.3.9.18	89,14
1.2.3.4	14,32	10.3.9.13	151,22
1.2.3.9	100,56	10.3.9.17	89,26
1.2.3.10	137,94	10.3.9.18	31,10
7.2.3.4	136,81	6.5.13.9	91,73
7.2.3.9	21,93	6.5.13.19	29,29
7.2.3.10	99,56	6.5.13.20	147,59
8.2.3.4	107,60	4.5.13.9	24,95
8.2.3.9	137,53	4.5.13.19	145,97
8.2.3.10	16,03	4.5.13.20	95,73
2.3.4.11	45,23	14.5.13.9	145,53
2.3.4.12	169,46	14.5.13.19	93,45
9.3.4.11	162,52	14.5.13.20	24,85
9.3.4.12	73,25	5.13.9.3	3,57
10.3.4.11	78,21	5.13.9.17	122,71
10.3.4.12	46,02	5.13.9.18	116,51
3.4.5.6	74,73	19.13.9.3	117,29
3.4.5.13	42,44	19.13.9.17	1,83
3.4.5.14	161,79	19.13.9.18	122,62
11.4.5.6	43,49	20.13.9.3	123,96
11.4.5.13	160,66	20.13.9.17	116,91
11.4.5.14	79,99	20.13.9.18	3,87
12.4.5.6	167,00	5.6.1.2	41,82
12.4.5.13	75,83	15.6.1.2	79,84
12.4.5.14	43,53	16.6.1.2	162,89
4.5.6.1	18,92	5.6.1.21	163,44
4.5.6.15	140,49	15.6.1.21	41,78
4.5.6.16	102,23	16.6.1.21	75,49
13.5.6.1	95,77	5.6.1.22	80,24
13.5.6.15	25,80	15.6.1.22	158,10
13.5.6.16	143,07	16.6.1.22	40,83

FIGURE : 180

Atomes	Coordonnées		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,267	0,862	0
3	1,172	2,028	- 0,995
4	0,768	1,531	- 2,395
5	- 0,768	1,531	- 2,395
6	- 1,172	2,028	- 0,995
7	- 1,267	0,862	0
8	0	2,932	- 0,574
9	1,440	1,266	1,030
10	2,158	0,227	- 0,241
11	2,126	2,590	- 1,036
12	1,139	2,219	- 3,153
13	1,177	0,546	- 2,613
14	- 1,139	2,219	- 3,153
15	- 1,177	0,546	- 2,613
16	- 2,126	2,590	- 1,036
17	- 1,440	1,266	1,030
18	- 2,158	0,227	- 0,241
19	0	3,154	0,492
20	0	3,865	- 1,137
21	0	- 0,685	0,886
22	0	- 0,659	- 0,905

bicyclo (3.2.1) octane

14 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.7	111,55
1.2.3	112,08
2.3.4	111,13
2.3.8	108,42
9.2.1	109,34
10.2.3	109,84
11.3.2	110,86
20.8.3	111,21
19.8.3	112,79
12.4.3	109,90
13.4.3	112,05
21.1.2	110,13
22.1.2	109,34
4.3.8	103,80
11.3.8	111,55
12.4.13	107,73
9.2.10	106,22
19.8.20	109,36
21.1.22	106,21
3.4.5	105,21
3.8.6	99,19

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	1,401
Wb . .	9,716
Wd . .	7,111
ΣW . .	18,228

$\Delta\theta_{2.1.7}$	20"
ΔW	10^{-2} kcal

FIGURE : 181

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	161,89	8.3.4.12	89,84
22.1.2.3	76,70	8.3.4.5	28,44
22.1.2.10	45,70	8.3.4.13	150,43
21.1.2.9	45,55	2.3.4.12	153,82
21.1.2.3	166,97	2.3.4.5	87,91
21.1.2.10	70,64	2.3.4.13	34,09
7.1.2.9	77,05	4.3.8.19	164,72
7.1.2.3	44,36	4.3.8.20	71,99
7.1.2.10	166,76	4.3.8.6	45,14
10.2.3.11	53,22	11.3.8.19	75,86
10.2.3.8	175,99	11.3.8.20	47,43
10.2.3.4	70,55	11.3.8.6	164,56
9.2.3.11	62,97	2.3.8.19	46,49
9.2.3.8	59,80	2.3.8.20	169,78
9.2.3.4	173,26	2.3.8.6	73,09
1.2.3.11	175,62	13.4.5.14	119,73
1.2.3.8	61,62	13.4.5.6	121,99
1.2.3.4	51,85	12.4.5.15	119,73
11.3.4.12	30,05	12.4.5.6	118,27
11.3.4.5	148,33	3.4.5.15	121,99
11.3.4.13	89,68	3.4.5.14	118,27

Atomes	Coordonnées		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,283	0,838	0
3	1,174	2,085	0,890
4	0,768	3,317	0,063
5	- 0,768	3,317	0,063
6	- 1,174	2,085	0,890
7	- 1,283	0,838	0
8	0	1,910	1,869
9	2,132	0,204	0,362
10	1,542	1,138	- 1,047
11	2,131	2,269	1,418
12	1,136	4,222	0,546
13	1,179	3,290	- 0,945
14	- 1,136	4,222	0,546
15	- 1,179	3,290	- 0,945
16	- 2,131	2,269	1,418
17	- 2,131	0,204	0,362
18	- 1,542	1,138	- 1,047
19	0	0,949	2,383
20	0	2,701	2,617
21	0	- 0,655	0,910
22	0	- 0,697	- 0,877

bicyclo (3.2.1) octane

14 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.7	113,70
1.2.3	112,64
2.3.4	110,94
2.3.8	109,28
9.2.1	108,98
10.2.3	109,92
11.3.2	110,50
20.8.3	110,73
19.8.3	113,59
12.4.3	109,74
13.4.3	112,17
21.1.2	108,65
22.1.2	109,89
4.3.8	103,39
11.3.8	112,04
12.4.13	107,71
9.2.10	106,18
19.8.20	108,53
21.1.22	105,75
3.4.5	105,31
3.8.6	99,48

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	2,654
Wb . .	9,936
Wd . .	11,494
ΣW . .	24,083

$\Delta\theta_{2.1.7}$	20"
ΔW	3.10^{-3} kcal

FIGURE : 182

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	76,38	8.3.4.12	89,50
22.1.2.3	162,54	8.3.4.5	28,55
22.1.2.10	39,59	8.3.4.13	150,82
21.1.2.9	38,87	2.3.4.12	153,47
21.1.2.3	82,21	2.3.4.5	88,48
21.1.2.10	154,85	2.3.4.13	33,80
7.1.2.9	159,99	4.3.8.19	166,53
7.1.2.3	38,91	4.3.8.20	71,05
7.1.2.10	84,03	4.3.8.6	45,50
10.2.3.11	95,26	11.3.8.19	74,48
10.2.3.8	141,01	11.3.8.20	47,94
10.2.3.4	27,66	11.3.8.6	164,49
9.2.3.11	20,72	2.3.8.19	48,34
9.2.3.8	103,01	2.3.8.20	170,76
9.2.3.4	143,64	2.3.8.6	72,70
1.2.3.11	141,80	13.4.5.14	119,68
1.2.3.8	18,07	13.4.5.6	122,28
1.2.3.4	95,28	12.4.5.15	119,68
11.3.4.12	30,56	12.4.5.6	118,05
11.3.4.5	148,60	3.4.5.15	122,28
11.3.4.13	89,12	3.4.5.14	118,05

Atomes	Coordonnées		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,276	0,847	0
3	1,174	1,979	- 1,034
4	0,768	1,408	- 2,404
5	- 0,768	1,408	- 2,404
6	- 1,174	1,979	- 1,034
7	- 1,276	0,847	0
8	0	2,914	- 0,694
9	1,437	1,284	1,019
10	2,160	0,200	- 0,234
11	2,114	2,562	- 1,096
12	1,162	2,016	- 3,217
13	1,183	0,417	- 2,580
14	- 1,162	2,016	- 3,217
15	- 1,183	0,417	- 2,580
16	- 2,114	2,562	- 1,096
17	- 1,437	1,284	1,019
18	- 2,160	0,200	- 0,234
19	0	3,137	0,372
20	0	3,819	- 1,300
21	0	- 0,634	0,924
22	0	- 0,740	- 0,841

Angles (d°)	
2.1.7	112,85
1.2.3	110,60
2.3.4	110,10
2.3.8	110,50
9.2.1	109,56
10.2.3	109,74
11.3.2	111,66
20.8.3	112,49
19.8.3	109,90
12.4.3	111,24
13.4.3	112,39
21.1.2	108,24
22.1.2	111,42
4.3.8	102,74
11.3.8	109,84
12.4.13	104,44
9.2.10	107,59
19.8.20	111,96
21.1.22	104,22
3.4.5	105,30
3.8.6	99,43

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	158,88	8.3.4.12	91,38
22.1.2.3	80,26	8.3.4.5	29,23
22.1.2.10	40,95	8.3.4.13	151,91
21.1.2.9	44,86	2.3.4.12	150,91
21.1.2.3	165,73	2.3.4.5	88,48
21.1.2.10	73,06	2.3.4.13	34,20
7.1.2.9	74,90	4.3.8.19	162,04
7.1.2.3	45,97	4.3.8.20	72,48
7.1.2.10	167,18	4.3.8.6	46,76
10.2.3.11	55,03	11.3.8.19	79,02
10.2.3.8	177,61	11.3.8.20	46,46
10.2.3.4	69,60	11.3.8.6	165,70
9.2.3.11	62,89	2.3.8.19	44,61
9.2.3.8	59,69	2.3.8.20	170,09
9.2.3.4	172,48	2.3.8.6	70,67
1.2.3.11	176,25	13.4.5.14	116,71
1.2.3.8	61,18	13.4.5.6	122,67
1.2.3.4	51,62	12.4.5.15	116,71
11.3.4.12	26,28	12.4.5.6	120,61
11.3.4.5	146,89	3.4.5.15	122,67
11.3.4.13	90,43	3.4.5.14	120,61

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 6,081
Wb . .	10,904
Wd . .	7,425
ΣW . .	12,249

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

FIGURE : 183

bicyclo (3.2.1) octane

14 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions :

C---C $16600e^{-4,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4\text{Å}$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4\text{Å}$

Atomes	Coordonnées		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,267	0,861	0
3	1,171	2,132	0,856
4	0,768	3,370	0,036
5	- 0,768	3,370	0,036
6	- 1,171	2,132	0,856
7	- 1,267	0,861	0
8	0	2,018	1,848
9	2,138	0,244	0,342
10	1,565	1,117	- 1,049
11	2,103	2,309	1,429
12	1,155	4,280	0,493
13	1,201	3,387	- 0,963
14	- 1,155	4,280	0,493
15	- 1,201	3,387	- 0,963
16	- 2,103	2,309	1,429
17	- 2,138	0,244	0,342
18	- 1,565	1,117	- 1,049
19	0	1,100	2,434
20	0	2,869	2,527
21	0	- 0,714	0,863
22	0	- 0,694	- 0,879

Angles (d°)	
2.1.7	111,65
1.2.3	114,41
2.3.4	112,65
2.3.8	110,22
9.2.1	109,50
10.2.3	110,42
11.3.2	111,57
20.8.3	110,13
19.8.3	114,15
12.4.3	110,81
13.4.3	113,41
21.1.2	110,98
22.1.2	110,37
4.3.8	101,75
11.3.8	108,59
12.4.13	103,35
9.2.10	101,85
19.8.20	108,86
21.1.22	102,12
3.4.5	105,19
3.8.6	99,12

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	75,76	8.3.4.12	89,35
22.1.2.3	160,90	8.3.4.5	30,46
22.1.2.10	35,61	8.3.4.13	154,95
21.1.2.9	36,71	2.3.4.12	152,66
21.1.2.3	86,63	2.3.4.5	87,53
21.1.2.10	148,08	2.3.4.13	36,96
7.1.2.9	161,10	4.3.8.19	170,70
7.1.2.3	37,76	4.3.8.20	66,51
7.1.2.10	87,53	4.3.8.6	48,95
10.2.3.11	96,29	11.3.8.19	71,52
10.2.3.8	142,98	11.3.8.20	51,27
10.2.3.4	30,10	11.3.8.6	166,74
9.2.3.11	150,76	2.3.8.19	50,98
9.2.3.8	105,65	2.3.8.20	173,77
9.2.3.4	141,47	2.3.8.6	70,77
1.2.3.11	138,42	13.4.5.14	115,70
1.2.3.8	17,69	13.4.5.6	124,49
1.2.3.4	95,19	12.4.5.15	115,70
11.3.4.12	26,27	12.4.5.6	119,81
11.3.4.5	146,07	3.4.5.15	124,49
11.3.4.13	89,43	3.4.5.14	119,81

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 2,296
Wb . .	13,809
Wd . .	11,674
ΣW . .	23,186

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

FIGURE : 184

bicyclo (3.2.1) octane

14 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions :

C---C $16600e^{-4,63} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4\text{Å}$

$- 10,162r + 24$ $r < 2,4\text{Å}$

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,308	0,755	0
3	1,176	2,282	0,090
4	0	2,743	- 0,790
5	- 1,161	2,280	0,107
6	- 1,308	0,755	0
7	1,953	0,379	0,835
8	1,859	0,498	- 0,941
9	0,783	2,712	1,515
10	2,121	2,770	- 0,221
11	0,001	3,826	- 0,908
12	- 0,005	2,260	- 1,765
13	- 0,755	2,705	1,529
14	- 2,110	2,776	- 0,180
15	- 1,950	0,378	0,836
16	- 1,849	0,514	- 0,951
17	1,180	2,021	2,257
18	1,161	3,710	1,734
19	- 1,146	2,017	2,278
20	- 1,137	3,701	1,750
21	0	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1.) octanone-3

34 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	120,02	16.6.1	108,10
1.2.3	115,00	17.9.3	111,12
2.3.4	109,26	17.9.13	110,75
i	3,38	18.9.3	110,70
i'	3,99	18.9.13	110,46
1.6.5	114,44	19.13.5	111,72
7.2.1	109,36	19.13.9	111,58
7.2.3	109,82	20.13.5	110,56
8.2.1	108,17	20.13.9	110,32
8.2.3	108,63	21.1.6	120,00
9.3.2	110,76	21.1.2	119,98
9.3.4	104,53	9.3.10	110,77
10.3.2	110,35	13.5.14	110,00
10.3.4	111,03	3.9.13	105,20
11.4.3	111,10	9.13.5	104,87
11.4.5	111,28	3.4.5	98,82
12.4.3	112,52	4.5.6	109,29
12.4.5	112,63	13.5.4	104,84
13.5.6	111,32	7.2.8	105,40
14.5.4	111,13	11.4.12	110,10
14.5.6	110,16	15.6.16	106,52
15.6.5	109,70	17.9.18	108,60
15.6.1	109,18	19.13.20	108,21
16.6.5	108,59		

Energie (kcal/mole)	
Wa	1,065
Wb	10,350
Wd	9,234
Wdp. . . .	
ΣW	20,649
W_L	
$ΣW+W_L$ . . .	

$\Delta\theta_{2.1.6}$	5'
ΔW	$2\ 10^{-2}$ kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	3,72	13.5.6.16	165,65
6.1.2.7	127,81	14.5.6.1	164,20
6.1.2.8	117,88	14.5.6.15	72,70
21.1.2.3	176,28	14.5.6.16	43,34
21.1.2.7	52,19	2.3.9.13	89,28
21.1.2.8	62,12	2.3.9.17	30,62
1.2.3.4	40,44	2.3.9.18	151,39
1.2.3.9	74,19	4.3.9.13	28,28
1.2.3.10	162,79	4.3.9.17	148,18
7.2.3.4	164,28	4.3.9.18	91,05
7.2.3.9	49,65	10.3.9.13	147,93
7.2.3.10	73,37	10.3.9.17	92,17
8.2.3.4	80,92	10.3.9.18	28,60
8.2.3.9	164,45	6.5.13.9	90,40
8.2.3.10	41,43	6.5.13.19	30,52
2.3.4.11	168,62	6.5.13.20	150,81
2.3.4.12	44,66	4.5.13.9	27,65
9.3.4.5	44,17	4.5.13.19	148,57
9.3.4.11	72,80	4.5.13.20	91,14
9.3.4.12	163,24	14.5.13.9	147,21
10.3.4.5	163,65	14.5.13.19	91,88
10.3.4.11	46,68	14.5.13.20	28,41
10.3.4.12	77,29	5.13.9.3	0,38
3.4.5.6	75,38	5.13.9.17	120,54
3.4.5.13	44,05	5.13.9.18	119,09
3.4.5.14	162,85	19.13.9.3	120,46
11.4.5.6	167,79	19.13.9.17	0,29
11.4.5.13	72,79	19.13.9.18	120,04
11.4.5.14	46,01	20.13.9.3	119,21
12.4.5.6	43,61	20.13.9.17	120,65
12.4.5.13	163,03	20.13.9.18	0,24
12.4.5.14	78,17	5.6.1.2	4,38
4.5.6.1	41,84	15.6.1.2	127,76
4.5.6.15	164,94	16.6.1.2	116,74
4.5.6.16	79,02	5.6.1.21	175,62
13.5.6.1	73,49	15.6.1.21	52,24
13.5.6.15	49,60	16.6.1.21	63,26

FIGURE : 185

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,309	0,754	0
3	1,148	2,279	- 0,087
4	- 0,002	2,601	- 1,058
5	- 1,191	2,279	- 0,135
6	- 1,309	0,754	0
7	1,891	0,485	0,918
8	1,915	0,405	- 0,975
9	0,709	2,85	1,273
10	2,094	2,753	- 0,415
11	0,007	3,652	- 1,342
12	0,020	1,973	- 1,947
13	- 0,826	2,931	1,210
14	- 2,132	2,707	- 0,536
15	- 1,882	0,499	0,928
16	- 1,940	0,364	- 0,839
17	1,035	2,212	2,093
18	1,137	3,839	1,430
19	- 1,284	2,395	2,040
20	- 1,153	3,970	1,229
21	0,002	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octanone-3

34 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions du tableau 8

Angles (d°)			
2.1.6	120,13	16.6.1	108,36
1.2.3	113,89	17.9.3	111,27
2.3.4	108,76	17.9.13	111,10
i	3,26	18.9.3	110,65
i'	5,05	18.9.13	110,49
1.6.5	115,44	19.13.5	111,19
7.2.1	109,34	19.13.9	111,25
7.2.3	109,81	20.13.5	110,56
8.2.1	108,30	20.13.9	110,41
8.2.3	108,74	21.1.6	120,02
9.3.2	110,38	21.1.2	119,85
9.3.4	105,45	9.3.10	110,23
10.3.2	110,68	13.5.14	110,71
10.3.4	111,22	3.9.13	105,55
11.4.3	111,11	9.13.5	104,48
11.4.5	111,38	3.4.5	98,98
12.4.3	112,31	4.5.6	108,62
12.4.5	112,64	13.5.4	104,60
13.5.6	111,20	7.2.8	106,48
14.5.4	111,00	11.4.12	110,04
14.5.6	110,55	15.6.16	104,68
15.6.5	109,72	17.9.18	107,82
15.6.1	109,29	19.13.20	109,31
16.6.5	108,79		

Energie (kcal/mole)	
Wa	1,245
Wb	10,322
Wd	9,837
Wdp. . . .	
ΣW	21,404
W_L	
$ΣW+W_L$ . . .	

$\Delta\theta_{2.1.6}$	5'
ΔW	10^{-2} kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	3,56	13.5.6.16	158,22
6.1.2.7	119,69	14.5.6.1	156,84
6.1.2.8	124,66	14.5.6.15	79,16
21.1.2.3	176,44	14.5.6.16	34,81
21.1.2.7	60,31	2.3.9.13	94,15
21.1.2.8	55,34	2.3.9.17	26,47
1.2.3.4	38,92	2.3.9.18	146,31
1.2.3.9	76,31	4.3.9.13	23,15
1.2.3.10	161,38	4.3.9.17	143,77
7.2.3.4	161,91	4.3.9.18	96,40
7.2.3.9	46,69	10.3.9.13	143,28
7.2.3.10	75,62	10.3.9.17	96,11
8.2.3.4	81,94	10.3.9.18	23,73
8.2.3.9	162,83	6.5.13.9	85,54
8.2.3.10	40,52	6.5.13.19	84,46
2.3.4.11	165,87	6.5.13.20	155,78
2.3.4.12	42,13	4.5.13.9	31,51
9.3.4.5	41,42	4.5.13.19	151,51
9.3.4.11	75,74	4.5.13.20	87,17
9.3.4.12	160,51	14.5.13.9	151,15
10.3.4.5	160,90	14.5.13.19	88,86
10.3.4.11	43,73	14.5.13.20	32,46
10.3.4.12	80,01	5.13.9.3	5,05
3.4.5.6	74,11	5.13.9.17	115,67
3.4.5.13	44,71	5.13.9.18	124,71
3.4.5.14	164,15	19.13.9.3	124,87
11.4.5.6	168,92	19.13.9.17	4,14
11.4.5.13	72,25	19.13.9.18	115,48
11.4.5.14	47,18	20.13.9.3	113,58
12.4.5.6	44,72	20.13.9.17	125,69
12.4.5.13	163,54	20.13.9.18	6,07
12.4.5.14	77,02	5.6.1.2	5,60
4.5.6.1	34,82	15.6.1.2	118,63
4.5.6.15	158,82	16.6.1.2	127,85
4.5.6.16	87,20	5.6.1.21	174,40
13.5.6.1	79,76	15.6.1.21	61,37
13.5.6.15	44,25	16.6.1.21	52,15

FIGURE : 186

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,288	0,788	0
3	1,176	2,006	- 0,929
4	0,768	1,563	- 2,345
5	- 0,768	1,563	- 2,345
6	- 1,176	2,006	- 0,929
7	- 1,288	0,788	0
8	0	2,885	- 0,467
9	1,522	1,129	1,041
10	2,136	0,134	- 0,328
11	2,125	2,578	- 0,950
12	1,141	2,274	- 3,081
13	1,171	0,582	- 2,592
14	- 1,141	2,274	- 3,081
15	- 1,171	0,582	- 2,592
16	- 2,125	2,578	- 0,950
17	- 1,522	1,129	1,041
18	- 2,136	0,134	- 0,328
19	0	3,054	0,608
20	0	3,836	- 0,997
21	0	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octanone-3

12 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.7	117,07
1.2.3	110,60
2.3.4	110,34
13.4.5	111,71
2.3.8	109,08
3.8.6	99,68
1.2.9	109,67
1.2.10	109,92
11.3.4	110,99
20.8.3	110,66
19.8.20	110,15
12.4.5	110,05
3.4.5	105,38
4.3.8	103,75
8.3.11	111,46
12.4.13	107,95
9.2.10	106,99
19.8.3	112,66
21.1.2	121,46

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	1,208
Wb . .	9,155
Wd . .	6,731
Wdp. .	
ΣW	17,094
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	1'
ΔW	2.10^{-3} kcal

FIGURE : 187

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	99,19
21.1.2.3	139,74
21.1.2.10	18,18
7.1.2.9	80,81
7.1.2.3	40,26
7.1.2.10	161,82
10.2.3.11	57,26
10.2.3.8	179,58
10.2.3.4	66,20
9.2.3.11	60,10
9.2.3.8	63,08
9.2.3.4	176,44
1.2.3.11	178,84
1.2.3.8	57,99
1.2.3.4	55,36
11.3.4.12	29,15
11.3.4.5	147,77
11.3.4.13	90,74
8.3.4.12	90,66
8.3.4.5	27,95
8.3.4.13	149,44
2.3.4.12	152,62
2.3.4.5	88,77
2.3.4.13	32,72
4.3.8.19	164,14
4.3.8.20	72,05
4.3.8.6	44,48
11.3.8.19	76,36
11.3.8.20	47,45
11.3.8.6	163,98
2.3.8.19	46,54
2.3.8.20	170,35
2.3.8.6	73,12
13.4.5.14	119,90
13.4.5.6	121,49
12.4.5.15	119,90
12.4.5.6	118,61
3.4.5.15	121,49
3.4.5.14	118,61

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,305	0,759	0
3	1,167	2,289	0,020
4	0,768	2,822	- 1,367
5	- 0,768	2,822	- 1,367
6	- 1,167	2,289	0,020
7	- 1,305	0,759	0
8	0	2,670	0,948
9	1,882	0,453	0,910
10	1,934	0,442	- 0,872
11	2,117	2,755	0,351
12	1,138	3,838	- 1,494
13	1,176	2,212	- 2,172
14	- 1,138	3,838	- 1,494
15	- 1,176	2,212	- 2,172
16	- 2,117	2,755	0,351
17	- 1,882	0,453	0,910
18	- 1,934	0,442	- 0,872
19	0	2,111	1,882
20	0	3,740	1,152
21	0	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octanone-3

12 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.7	119,62
1.2.3	115,03
2.3.4	110,88
13.4.5	112,02
2.3.8	108,83
3.8.6	98,66
1.2.9	107,93
1.2.10	110,04
11.3.4	110,22
20.8.3	110,87
19.8.20	110,12
12.4.5	109,88
3.4.5	105,04
4.3.8	105,12
8.3.11	111,46
12.4.13	107,98
9.2.10	105,43
19.8.3	112,95
21.1.2	120,19

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	1,073
Wb . .	10,519
Wd . .	9,102
Wdp. .	
ΣW	20,693
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	0,03 kcal

FIGURE : 188

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	58,64
21.1.2.3	179,18
21.1.2.10	55,92
7.1.2.9	121,36
7.1.2.3	0,82
7.1.2.10	124,08
10.2.3.11	73,69
10.2.3.8	163,80
10.2.3.4	48,64
9.2.3.11	40,87
9.2.3.8	81,65
9.2.3.4	163,20
1.2.3.11	161,39
1.2.3.8	38,87
1.2.3.4	76,28
11.3.4.12	29,70
11.3.4.5	147,84
11.3.4.13	90,33
8.3.4.12	90,53
8.3.4.5	27,61
8.3.4.13	149,45
2.3.4.12	152,03
2.3.4.5	89,83
2.3.4.13	32,00
4.3.8.19	162,91
4.3.8.20	72,95
4.3.8.6	43,38
11.3.8.19	77,68
11.3.8.20	46,46
11.3.8.6	162,79
2.3.8.19	44,08
2.3.8.20	168,22
2.3.8.6	75,44
13.4.5.14	120,03
13.4.5.6	121,83
12.4.5.15	120,03
12.4.5.6	118,14
3.4.5.15	121,83
3.4.5.14	118,14

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,299	0,770	0
3	1,171	2,209	- 0,523
4	0,768	2,211	- 2,009
5	- 0,768	2,211	- 2,009
6	- 1,171	2,209	- 0,523
7	- 1,299	0,770	0
8	0	2,899	0,199
9	1,711	0,794	1,041
10	2,049	0,220	- 0,624
11	2,120	2,761	- 0,377
12	1,139	3,114	- 2,492
13	1,174	1,352	- 2,541
14	- 1,139	3,114	- 2,492
15	- 1,174	1,352	- 2,541
16	- 2,120	2,761	- 0,377
17	- 1,711	0,794	1,041
18	- 2,049	0,220	- 0,624
19	0	2,721	1,274
20	0	3,969	- 0,002
21	0	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octanone-3

12 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions du tableau 8

paramètres de torsion B*

Angles (d°)	
2.1.7	118,67
1.2.3	113,94
2.3.4	110,61
13.4.5	111,90
2.3.8	108,88
3.8.6	99,03
1.2.9	109,12
1.2.10	109,02
11.3.4	110,53
20.8.3	110,73
19.8.20	110,05
12.4.5	109,91
3.4.5	105,16
4.3.8	104,69
8.3.11	111,46
12.4.13	108,05
9.2.10	106,35
19.8.3	112,96
21.1.2	120,66

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	0,989
Wb . .	9,718
Wd . .	7,688
Wdp. .	
ΣW	18,396
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	20"
ΔW	10^{-4} kcal

FIGURE : 189

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	79,65
21.1.2.3	158,12
21.1.2.10	36,11
7.1.2.9	100,35
7.1.2.3	21,88
7.1.2.10	143,89
10.2.3.11	65,33
10.2.3.8	171,93
10.2.3.4	57,41
9.2.3.11	50,43
9.2.3.8	72,31
9.2.3.4	173,18
1.2.3.11	172,66
1.2.3.8	49,92
1.2.3.4	64,60
11.3.4.12	29,55
11.3.4.5	147,80
11.3.4.13	90,51
8.3.4.12	90,58
8.3.4.5	27,67
8.3.4.13	149,36
2.3.4.12	152,29
2.3.4.5	89,46
2.3.4.13	32,23
4.3.8.19	163,41
4.3.8.20	72,65
4.3.8.6	43,66
11.3.8.19	77,09
11.3.8.20	46,85
11.3.8.6	163,16
2.3.8.19	45,10
2.3.8.20	169,03
2.3.8.6	74,65
13.4.5.14	120,05
13.4.5.6	121,69
12.4.5.15	120,05
12.4.5.6	118,25
3.4.5.15	121,69
3.4.5.14	118,25

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,307	0,757	0
3	1,157	2,286	0,008
4	0,768	2,809	- 1,386
5	- 0,768	2,809	- 1,386
6	- 1,157	2,286	0,008
7	- 1,307	0,757	0
8	0	2,678	0,943
9	1,901	0,449	0,904
10	1,920	0,445	- 0,992
11	2,108	2,754	0,332
12	1,140	3,824	- 1,519
13	1,179	2,194	- 2,186
14	- 1,140	3,824	- 1,519
15	- 1,179	2,194	- 2,186
16	- 2,108	2,754	0,332
17	- 1,901	0,449	0,904
18	- 1,920	0,445	- 0,892
19	0	2,124	1,881
20	0	3,749	1,137
21	0	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octanone-3

12 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions du tableau 8

paramètres de torsion B*

Angles (d°)	
2.1.7	119,84
1.2.3	114,50
2.3.4	111,03
13.4.5	112,15
2.3.8	109,26
3.8.6	97,52
1.2.9	108,74
1.2.10	109,52
11.3.4	109,78
20.8.3	111,05
19.8.20	110,33
12.4.5	109,96
3.4.5	104,65
4.3.8	105,88
8.3.11	111,06
12.4.13	107,95
9.2.10	105,84
19.8.3	113,18
21.1.2	120,08

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	1,124
Wb . .	10,545
Wd . .	7,660
Wdp. .	
ΣW	19,328
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

FIGURE : 190

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	58,03
21.1.2.3	179,74
21.1.2.10	57,09
7.1.2.9	121,97
7.1.2.3	0,26
7.1.2.10	122,91
10.2.3.11	74,93
10.2.3.8	163,05
10.2.3.4	46,64
9.2.3.11	40,19
9.2.3.8	81,83
9.2.3.4	161,76
1.2.3.11	161,85
1.2.3.8	39,83
1.2.3.4	76,58
11.3.4.12	29,96
11.3.4.5	148,02
11.3.4.13	90,16
8.3.4.12	90,00
8.3.4.5	28,06
8.3.4.13	149,88
2.3.4.12	151,53
2.3.4.5	90,41
2.3.4.13	31,41
4.3.8.19	162,89
4.3.8.20	72,38
4.3.8.6	43,66
11.3.8.19	77,99
11.3.8.20	46,73
11.3.8.6	162,78
2.3.8.19	43,25
2.3.8.20	167,98
2.3.8.6	75,98
13.4.5.14	120,12
13.4.5.6	121,82
12.4.5.15	120,12
12.4.5.6	118,06
3.4.5.15	121,82
3.4.5.14	118,06

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,282	0,798	0
3	1,178	2,011	- 0,936
4	0,768	1,555	- 2,348
5	- 0,768	1,555	- 2,348
6	- 1,178	2,011	- 0,936
7	- 1,282	0,798	0
8	0	2,881	- 0,465
9	1,505	1,147	1,041
10	2,134	0,144	- 0,321
11	2,117	2,599	- 0,952
12	1,169	2,216	- 3,115
13	1,173	0,573	- 2,590
14	- 1,169	2,216	- 3,115
15	- 1,173	0,573	- 2,590
16	- 2,117	2,599	- 0,952
17	- 1,505	1,147	1,041
18	- 2,134	0,144	- 0,321
19	0	3,056	0,610
20	0	3,833	- 0,995
21	0	- 0,1225	0

bicyclo (3.2.1) octanone-3

12 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4$Å

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4$Å

Angles (d°)	
2.1.7	116,23
1.2.3	111,08
2.3.4	110,09
13.4.5	111,82
2.3.8	108,17
3.8.6	99,91
1.2.9	109,49
1.2.10	109,72
11.3.4	111,73
20.8.3	110,18
19.8.20	109,88
12.4.5	111,60
3.4.5	105,46
4.3.8	104,15
8.3.11	110,64
12.4.13	104,70
9.2.10	107,26
19.8.3	113,16
21.1.2	121,88

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 3,403
Wb . .	9,539
Wd . .	6,927
Wdp. .	
ΣW	13,062
W_L . .	
$\Sigma W + W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

FIGURE : 191

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	99,75
21.1.2.3	139,20
21.1.2.10	17,71
7.1.2.9	80,25
7.1.2.3	40,80
7.1.2.10	162,29
10.2.3.11	58,00
10.2.3.8	180,00
10.2.3.4	66,77
9.2.3.11	59,47
9.2.3.8	62,56
9.2.3.4	175,76
1.2.3.11	179,50
1.2.3.8	58,49
1.2.3.4	54,72
11.3.4.12	25,38
11.3.4.5	146,74
11.3.4.13	91,53
8.3.4.12	94,08
8.3.4.5	27,27
8.3.4.13	149,01
2.3.4.12	150,15
2.3.4.5	88,49
2.3.4.13	33,25
4.3.8.19	163,95
4.3.8.20	72,59
4.3.8.6	43,35
11.3.8.19	75,85
11.3.8.20	47,61
11.3.8.6	163,55
2.3.8.19	46,84
2.3.8.20	170,31
2.3.8.6	73,76
13.4.5.14	116,91
13.4.5.6	121,74
12.4.5.15	116,91
12.4.5.6	121,36
3.4.5.15	121,74
3.4.5.14	121,36

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,305	0,759	0
3	1,160	2,288	0,036
4	0,768	2,846	- 1,343
5	- 0,768	2,846	- 1,343
6	- 1,160	2,288	0,036
7	- 1,305	0,759	0
8	0	2,669	0,974
9	1,919	0,430	0,877
10	1,921	0,457	- 0,886
11	2,100	2,756	0,389
12	1,149	3,859	- 1,467
13	1,191	2,273	- 2,167
14	- 1,149	3,859	- 1,467
15	- 1,191	2,273	- 2,167
16	- 2,100	2,756	0,389
17	- 1,919	0,430	0,877
18	- 1,921	0,457	- 0,886
19	0	2,101	1,903
20	0	3,739	1,176
21	0	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octanone-3

12 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions :

C---C $16600e^{-4,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4$Å

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4$Å

Angles (d°)	
2.1.7	119,62
1.2.3	114,75
2.3.4	111,34
13.4.5	112,85
2.3.8	109,39
3.8.6	97,79
1.2.9	109,03
1.2.10	109,84
11.3.4	110,34
20.8.3	110,85
19.8.20	110,75
12.4.5	110,50
3.4.5	104,74
4.3.8	105,34
8.3.11	109,96
12.4.13	105,51
9.2.10	103,78
19.8.3	113,01
21.1.2	120,19

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 1,505
Wb . .	11,194
Wd . .	9,236
Wdp. .	
ΣW	18,926
W_L . .	
$\Sigma W + W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	10^{-2} kcal

FIGURE : 192

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	55,91
21.1.2.3	178,51
21.1.2.10	57,19
7.1.2.9	124,09
7.1.2.3	1,49
7.1.2.10	122,81
10.2.3.11	75,62
10.2.3.8	163,30
10.2.3.4	47,28
9.2.3.11	37,48
9.2.3.8	83,61
9.2.3.4	160,37
1.2.3.11	160,08
1.2.3.8	38,99
1.2.3.4	77,03
11.3.4.12	27,97
11.3.4.5	146,97
11.3.4.13	89,89
8.3.4.12	90,66
8.3.4.5	28,34
8.3.4.13	151,48
2.3.4.12	150,86
2.3.4.5	90,13
2.3.4.13	33,00
4.3.8.19	163,41
4.3.8.20	71,59
4.3.8.6	44,29
11.3.8.19	77,69
11.3.8.20	47,31
11.3.8.6	163,19
2.3.8.19	43,63
2.3.8.20	168,63
2.3.8.6	75,49
13.4.5.14	117,86
13.4.5.6	123,14
12.4.5.15	117,86
12.4.5.6	119,00
3.4.5.15	123,14
3.4.5.14	119,00

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,299	0,771	0
3	1,166	2,199	- 0,548
4	0,768	2,174	- 2,034
5	- 0,768	2,174	- 2,034
6	- 1,166	2,199	- 0,548
7	- 1,299	0,771	0
8	0	2,914	0,157
9	1,700	0,813	1,045
10	2,052	0,214	- 0,613
11	2,107	2,766	- 0,402
12	1,166	3,035	- 2,568
13	1,183	1,315	- 2,560
14	- 1,166	3,035	- 2,568
15	- 1,183	1,315	- 2,560
16	- 2,107	2,766	- 0,402
17	- 1,700	0,813	1,045
18	- 2,052	0,214	- 0,613
19	0	2,753	1,234
20	0	3,979	- 0,072
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	118,63
1.2.3	113,62
2.3.4	110,57
13.4.5	112,40
2.3.8	109,50
3.8.6	98,56
1.2.9	109,15
1.2.10	108,97
11.3.4	110,83
20.8.3	110,94
19.8.20	110,64
12.4.5	111,46
3.4.5	105,00
4.3.8	104,72
8.3.11	110,24
12.4.13	104,29
9.2.10	106,77
19.8.3	112,63
21.1.2	120,68

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	80,86
21.1.2.3	157,09
21.1.2.10	35,39
7.1.2.9	99,14
7.1.2.3	22,91
7.1.2.10	144,61
10.2.3.11	65,91
10.2.3.8	172,27
10.2.3.4	57,38
9.2.3.11	50,34
9.2.3.8	71,48
9.2.3.4	173,64
1.2.3.11	172,39
1.2.3.8	50,57
1.2.3.4	64,31
11.3.4.12	26,19
11.3.4.5	147,01
11.3.4.13	90,49
8.3.4.12	92,67
8.3.4.5	28,16
8.3.4.13	150,66
2.3.4.12	149,49
2.3.4.5	89,69
2.3.4.13	32,81
4.3.8.19	163,28
4.3.8.20	72,08
4.3.8.6	44,32
11.3.8.19	77,47
11.3.8.20	47,17
11.3.8.6	163,57
2.3.8.19	44,70
2.3.8.20	169,34
2.3.8.6	74,26
13.4.5.14	116,68
13.4.5.6	122,50
12.4.5.15	116,68
12.4.5.6	120,82
3.4.5.15	122,50
3.4.5.14	120,82

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 3,587
Wb . .	10,301
Wd . .	7,844
Wdp. .	
ΣW	14,557
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	4.10^{-4} kcal

FIGURE : 193

bicyclo (3.2.1) octanone-3

12 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4$Å

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4$Å

paramètres de torsion B*

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,305	0,760	0
3	1,157	2,289	0,002
4	0,768	2,864	- 1,371
5	- 0,768	2,864	- 1,371
6	- 1,157	2,289	0,002
7	- 1,305	0,760	0
8	0	2,691	0,934
9	1,831	0,490	0,978
10	2,008	0,401	- 0,870
11	2,095	2,758	0,357
12	1,172	3,865	- 1,519
13	1,202	2,319	- 2,209
14	- 1,172	3,865	- 1,519
15	- 1,202	2,319	- 2,209
16	- 2,095	2,758	0,357
17	- 1,831	0,490	0,978
18	- 2,008	0,401	- 0,870
19	0	2,181	1,897
20	0	3,770	1,085
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	119,56
1.2.3	114,68
2.3.4	113,27
13.4.5	113,49
2.3.8	109,49
3.8.6	97,44
1.2.9	106,52
1.2.10	112,39
11.3.4	109,90
20.8.3	110,03
19.8.20	110,00
12.4.5	111,76
3.4.5	104,62
4.3.8	104,67
8.3.11	109,39
12.4.13	101,98
9.2.10	106,63
19.8.3	114,37
21.1.2	120,22

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	63,00
21.1.2.3	180,00
21.1.2.10	52,65
7.1.2.9	117,00
7.1.2.3	0
7.1.2.10	127,35
10.2.3.11	72,48
10.2.3.8	167,35
10.2.3.4	50,96
9.2.3.11	43,17
9.2.3.8	77,00
9.2.3.4	166,61
1.2.3.11	160,08
1.2.3.8	39,90
1.2.3.4	76,49
11.3.4.12	25,69
11.3.4.5	146,81
11.3.4.13	88,97
8.3.4.12	91,70
8.3.4.5	29,41
8.3.4.13	153,64
2.3.4.12	149,09
2.3.4.5	89,79
2.3.4.13	34,43
4.3.8.19	167,15
4.3.8.20	68,46
4.3.8.6	46,08
11.3.8.19	75,06
11.3.8.20	49,33
11.3.8.6	163,87
2.3.8.19	45,43
2.3.8.20	169,82
2.3.8.6	75,64
13.4.5.14	114,66
13.4.5.6	124,23
12.4.5.15	114,66
12.4.5.6	121,12
3.4.5.15	124,23
3.4.5.14	121,12

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	- 3,342
Wb . .	13,852
Wd . .	7,198
Wdp. .	
ΣW	17,708
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	1'
ΔW	10^{-2} kcal

FIGURE : 194

bicyclo (3.2.1) octanone-3

12 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4$Å

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4$Å

paramètres de torsion B*

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,313	0,746	0
3	1,152	2,267	0,145
4	- 0,019	2,732	- 0,737
5	- 1,190	2,270	0,149
6	- 1,313	0,746	0
7	1,963	0,353	0,823
8 Br	2,262	0,370	- 1,650
9	0,757	2,612	1,592
10	2,090	2,783	- 0,142
11	- 0,018	3,815	- 0,856
12	- 0,026	2,233	- 1,705
13	- 0,781	2,658	1,581
14	- 2,135	2,769	- 0,144
15	- 1,970	0,339	0,811
16	- 1,849	0,518	- 0,956
17	1,117	1,864	2,297
18	1,165	3,580	1,879
19	- 1,200	1,970	2,314
20	- 1,128	3,666	1,806
21	- 0,003	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octanone-3
α bromée (Br. axial)

34 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	2,0
μ_D	3,83D

Angles (d°)			
2.1.6	120,79	16.6.1	108,43
1.2.3	113,46	17.9.3	111,70
2.3.4	108,96	17.9.13	110,87
i	5,43	18.9.3	110,53
i'	5,56	18.9.13	110,42
1.6.5	114,86	19.13.5	111,59
7.2.1	109,34	19.13.9	111,09
7.2.3	109,80	20.13.5	110,21
8.2.1	109,23	20.13.9	110,18
8.2.3	108,89	21.1.6	119,47
9.3.2	109,75	21.1.2	119,74
9.3.4	106,01	9.3.10	110,87
10.3.2	110,37	13.5.14	110,98
10.3.4	110,77	3.9.13	104,85
11.4.3	111,27	9.13.5	105,35
11.4.5	111,26	3.4.5	99,08
12.4.3	112,07	4.5.6	107,67
12.4.5	111,63	13.5.4	104,94
13.5.6	111,22	7.2.8	105,84
14.5.4	111,18	11.4.12	111,03
14.5.6	110,68	15.6.16	105,26
15.6.5	109,70	17.9.18	108,46
15.6.1	109,32	19.13.20	108,82
16.6.5	108,83		

Energie (kcal/mole)	
Wa	1,505
Wb	10,229
Wd	9,421
Wdp. . . .	3,747
ΣW	24,902
W_L	- 1,579
$\Sigma W+W_L$ . . .	23,323

$\Delta\theta_{2.1.6}$	1"
ΔW	$4\ 10^{-3}$ kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	5,92	13.5.6.16	166,03
6.1.2.7	128,85	14.5.6.1	163,92
6.1.2.8	115,75	14.5.6.15	72,49
21.1.2.3	174,08	14.5.6.16	42,18
21.1.2.7	51,15	2.3.9.13	92,98
21.1.2.8	64,25	2.3.9.17	27,16
1.2.3.4	42,29	2.3.9.18	148,02
1.2.3.9	73,38	4.3.9.13	24,55
1.2.3.10	164,13	4.3.9.17	144,70
7.2.3.4	164,97	4.3.9.18	94,45
7.2.3.9	49,30	10.3.9.13	144,83
7.2.3.10	73,19	10.3.9.17	95,02
8.2.3.4	79,58	10.3.9.18	25,83
8.2.3.9	164,75	6.5.13.9	87,12
8.2.3.10	42,26	6.5.13.19	33,42
2.3.4.11	166,16	6.5.13.20	154,15
2.3.4.12	41,18	4.5.13.9	29,01
9.3.4.5	41,35	4.5.13.19	149,55
9.3.4.11	75,79	4.5.13.20	89,71
9.3.4.12	159,23	14.5.13.9	149,19
10.3.4.5	161,70	14.5.13.19	90,27
10.3.4.11	44,56	14.5.13.20	30,47
10.3.4.12	80,42	5.13.9.3	2,74
3.4.5.6	75,75	5.13.9.17	117,96
3.4.5.13	42,81	5.13.9.18	121,81
3.4.5.14	162,86	19.13.9.3	123,47
11.4.5.6	167,10	19.13.9.17	2,77
11.4.5.13	74,34	19.13.9.18	117,46
11.4.5.14	45,71	20.13.9.3	115,86
12.4.5.6	42,46	20.13.9.17	123,44
12.4.5.13	161,02	20.13.9.18	3,20
12.4.5.14	78,94	5.6.1.2	6,12
4.5.6.1	42,22	15.6.1.2	129,91
4.5.6.15	165,80	16.6.1.2	115,83
4.5.6.16	79,52	5.6.1.21	173,88
13.5.6.1	72,23	15.6.1.21	50,09
13.5.6.15	51,36	16.6.1.21	64,17

FIGURE : 195

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,308	0,754	0
3	1,163	2,278	- 0,117
4	- 0,005	2,604	- 1,066
5	- 1,180	2,279	- 0,127
6	- 1,308	0,754	0
7	1,882	0,498	0,927
8 Br	2,413	0,117	- 1,462
9	0,754	2,861	1,248
10	2,106	2,731	- 0,481
11	- 0,004	3,656	- 1,346
12	- 0,001	1,986	- 1,962
13	- 0,783	2,917	1,216
14	- 2,126	2,721	- 0,499
15	- 1,882	0,499	0,927
16	- 1,932	0,373	- 0,849
17	1,106	2,245	2,074
18	1,168	3,860	1,377
19	- 1,219	2,382	2,059
20	- 1,124	3,951	1,254
21	- 0,010	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octanone-3
α bromée (Br. eq.)

34 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	3
C - Br	2,1
μ_D	4,18D

Angles (d°)			
2.1.6	120,11	16.6.1	108,23
1.2.3	114,40	17.9.3	111,92
2.3.4	109,21	17.9.13	111,00
i	4,36	18.9.3	110,59
i'	4,74	18.9.13	110,38
1.6.5	115,04	19.13.5	111,86
7.2.1	109,27	19.13.9	111,45
7.2.3	109,76	20.13.5	110,29
8.2.1	109,25	20.13.9	110,23
8.2.3	108,80	21.1.6	119,49
9.3.2	109,48	21.1.2	120,39
9.3.4	105,39	9.3.10	111,29
10.3.2	110,45	13.5.14	110,35
10.3.4	110,88	3.9.13	105,11
11.4.3	111,27	9.13.5	105,09
11.4.5	111,18	3.4.5	99,12
12.4.3	112,64	4.5.6	108,91
12.4.5	112,61	13.5.4	104,36
13.5.6	111,15	7.2.8	104,92
14.5.4	111,28	11.4.12	109,70
14.5.6	110,63	15.6.16	105,35
15.6.5	109,70	17.9.18	107,85
15.6.1	109,30	19.13.20	108,33
16.6.5	108,76		

Energie (kcal/mole)	
Wa	1,455
Wb	10,384
Wd	9,820
Wdp. . . .	4,296
ΣW	25,955
W_L	- 1,478
$\Sigma W+W_L$ . . .	24,477

$\Delta\theta_{2.1.6}$	1'
ΔW	10^{-2} kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	4,79	13.5.6.16	160,00
6.1.2.7	118,71	14.5.6.1	158,59
6.1.2.8	127,02	14.5.6.15	77,71
21.1.2.3	175,21	14.5.6.16	37,04
21.1.2.7	61,29	2.3.9.13	92,87
21.1.2.8	52,98	2.3.9.17	27,71
1.2.3.4	36,93	2.3.9.18	148,00
1.2.3.9	77,99	4.3.9.13	24,48
1.2.3.10	159,13	4.3.9.17	145,06
7.2.3.4	160,18	4.3.9.18	94,66
7.2.3.9	45,26	10.3.9.13	144,75
7.2.3.10	77,63	10.3.9.17	94,67
8.2.3.4	85,54	10.3.9.18	25,61
8.2.3.9	159,54	6.5.13.9	86,94
8.2.3.10	36,65	6.5.13.19	34,03
2.3.4.11	167,56	6.5.13.20	154,39
2.3.4.12	43,90	4.5.13.9	30,30
9.3.4.5	42,17	4.5.13.19	151,27
9.3.4.11	74,91	4.5.13.20	88,38
9.3.4.12	161,43	14.5.13.9	149,94
10.3.4.5	162,71	14.5.13.19	89,09
10.3.4.11	45,63	14.5.13.20	31,27
10.3.4.12	78,03	5.13.9.3	3,56
3.4.5.6	74,53	5.13.9.17	117,63
3.4.5.13	44,24	5.13.9.18	122,84
3.4.5.14	163,26	19.13.9.3	124,66
11.4.5.6	168,33	19.13.9.17	3,47
11.4.5.13	72,90	19.13.9.18	116,07
11.4.5.14	46,11	20.13.9.3	115,01
12.4.5.6	44,76	20.13.9.17	123,80
12.4.5.13	163,53	20.13.9.18	4,26
12.4.5.14	77,46	5.6.1.2	5,24
4.5.6.1	35,98	15.6.1.2	118,67
4.5.6.15	159,68	16.6.1.2	127,08
4.5.6.16	85,57	5.6.1.21	174,76
13.5.6.1	78,45	15.6.1.21	61,33
13.5.6.15	45,25	16.6.1.21	52,92

FIGURE : 196

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,309	0,754	0
3	1,166	2,273	0,176
4	0,017	2,751	- 0,728
5	- 1,173	2,278	0,126
6	- 1,309	0,754	0
7 Br	2,509	0,015	1,333
8	1,838	0,556	- 0,967
9	0,726	2,593	1,616
10	2,114	2,783	- 0,087
11	0,022	3,835	- 0,835
12	0,029	2,273	- 1,706
13	- 0,810	2,670	1,570
14	- 2,112	2,778	- 0,184
15	- 1,961	0,363	0,823
16	- 1,848	0,519	- 0,953
17	1,040	1,825	2,320
18	1,142	3,545	1,942
19	- 1,260	1,997	2,298
20	- 1,144	3,686	1,777
21	- 0,009	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	120,12	16.6.1	108,24
1.2.3	114,41	17.9.3	112,06
2.3.4	108,02	17.9.13	110,04
i	6,59	18.9.3	110,64
i'	4,71	18.9.13	110,31
1.6.5	114,77	19.13.5	112,09
7.2.1	110,27	19.13.9	111,18
7.2.3	110,79	20.13.5	110,34
8.2.1	108,77	20.13.9	110,27
8.2.3	108,50	21.1.6	119,54
9.3.2	109,86	21.1.2	120,34
9.3.4	105,73	9.3.10	111,80
10.3.2	110,40	13.5.14	110,31
10.3.4	110,86	3.9.13	105,55
11.4.3	111,32	9.13.5	104,51
11.4.5	111,38	3.4.5	98,96
12.4.3	112,50	4.5.6	109,13
12.4.5	111,83	13.5.4	105,08
13.5.6	110,52	7.2.8	103,50
14.5.4	111,21	11.4.12	110,42
14.5.6	110,46	15.6.16	105,76
15.6.5	109,70	17.9.18	108,24
15.6.1	109,30	19.13.20	108,82
16.6.5	108,67		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	7,24	13.5.6.16	163,95
6.1.2.7	132,91	14.5.6.1	162,91
6.1.2.8	114,24	14.5.6.15	73,60
21.1.2.3	172,76	14.5.6.16	41,58
21.1.2.7	47,09	2.3.9.13	93,00
21.1.2.8	65,76	2.3.9.17	26,77
1.2.3.4	44,27	2.3.9.18	147,67
1.2.3.9	70,60	4.3.9.13	23,33
1.2.3.10	165,64	4.3.9.17	143,10
7.2.3.4	169,67	4.3.9.18	96,00
7.2.3.9	54,79	10.3.9.13	144,06
7.2.3.10	68,96	10.3.9.17	96,17
8.2.3.4	77,36	10.3.9.18	24,74
8.2.3.9	167,77	6.5.13.9	87,03
8.2.3.10	44,02	6.5.13.19	33,38
2.3.4.11	166,11	6.5.13.20	154,54
2.3.4.12	41,56	4.5.13.9	30,57
9.3.4.5	40,92	4.5.13.19	150,98
9.3.4.11	76,32	4.5.13.20	87,86
9.3.4.12	159,13	14.5.13.9	150,52
10.3.4.5	162,26	14.5.13.19	89,07
10.3.4.11	45,02	14.5.13.20	32,09
10.3.4.12	79,53	5.13.9.3	4,36
3.4.5.6	74,74	5.13.9.17	116,74
3.4.5.13	43,80	5.13.9.18	123,90
3.4.5.14	163,15	19.13.9.3	125,23
11.4.5.6	168,07	19.13.9.17	4,13
11.4.5.13	73,39	19.13.9.18	115,22
11.4.5.14	45,96	20.13.9.3	113,97
12.4.5.6	43,98	20.13.9.17	124,93
12.4.5.13	162,52	20.13.9.18	5,57
12.4.5.14	78,13	5.6.1.2	5,19
4.5.6.1	40,35	15.6.1.2	128,90
4.5.6.15	163,85	16.6.1.2	116,37
4.5.6.16	80,97	5.6.1.21	174,81
13.5.6.1	74,73	15.6.1.21	51,10
13.5.6.15	48,77	16.6.1.21	63,63

bicyclo (3.2.1) octanone-3
α bromée (Br. eq.)

34 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa	2,795
Wb	10,452
Wd	9,252
Wdp. . . .	4,342
ΣW	26,841
W_L	- 2,195
$\Sigma W+W_L$ . . .	24,646

μ (D)	
C = O	3
C - Br	2,1
μ_D	4,26

$\Delta\theta_{2.1.6}$	7'
ΔW	10^{-2} kcal

FIGURE : 197

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,314	0,744	0
3	1,163	2,271	- 0,083
4	- 0,029	2,571	- 1,079
5	- 1,177	2,265	- 0,173
6	- 1,314	0,744	0
7 Br	2,395	0,215	1,522
8	1,905	0,404	- 0,888
9	0,707	2,884	1,252
10	2,115	2,732	- 0,415
11	0,037	3,617	- 1,382
12	0,055	1,922	- 1,952
13	- 0,829	2,936	1,167
14	- 2,111	2,694	- 0,587
15	- 1,870	0,518	0,945
16	- 1,942	0,343	- 0,835
17	1,033	2,303	2,113
18	1,111	3,889	1,365
19	- 1,291	2,420	2,008
20	- 1,170	3,970	1,166
21	- 0,005	- 1,225	0

Angles (d°)			
2.1.6	120,92	16.6.1	108,14
1.2.3	113,88	17.9.3	112,62
2.3.4	107,53	17.9.13	111,12
i	3,11	18.9.3	110,34
i'	6,47	18.9.13	110,22
1.6.5	114,25	19.13.5	111,91
7.2.1	110,51	19.13.9	111,44
7.2.3	111,60	20.13.5	110,21
8.2.1	108,04	20.13.9	110,14
8.2.3	108,10	21.1.6	119,30
9.3.2	112,21	21.1.2	119,78
9.3.4	105,35	9.3.10	110,38
10.3.2	110,25	13.5.14	110,33
10.3.4	110,99	3.9.13	105,16
11.4.3	111,23	9.13.5	105,03
11.4.5	111,18	3.4.5	99,11
12.4.3	112,60	4.5.6	109,45
12.4.5	111,87	13.5.4	104,38
13.5.6	110,69	7.2.8	104,16
14.5.4	111,32	11.4.12	110,42
14.5.6	110,52	15.6.16	106,13
15.6.5	109,85	17.9.18	107,41
15.6.1	109,42	19.13.20	108,51
16.6.5	108,72		

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	3,40	13.5.6.16	157,70
6.1.2.7	123,14	14.5.6.1	156,03
6.1.2.8	123,50	14.5.6.15	80,57
21.1.2.3	176,60	14.5.6.16	35,16
21.1.2.7	56,86	2.3.9.13	92,23
21.1.2.8	56,50	2.3.9.17	28,92
1.2.3.4	40,08	2.3.9.18	148,93
1.2.3.9	75,32	4.3.9.13	24,48
1.2.3.10	161,20	4.3.9.17	145,63
7.2.3.4	166,05	4.3.9.18	94,36
7.2.3.9	50,65	10.3.9.13	144,36
7.2.3.10	72,83	10.3.9.17	94,49
8.2.3.4	79,98	10.3.9.18	25,52
8.2.3.9	164,62	6.5.13.9	87,33
8.2.3.10	41,14	6.5.13.19	33,61
2.3.4.11	165,26	6.5.13.20	154,17
2.3.4.12	40,71	4.5.13.9	30,34
9.3.4.5	42,18	4.5.13.19	151,28
9.3.4.11	74,88	4.5.13.20	88,16
9.3.4.12	160,57	14.5.13.9	150,02
10.3.4.5	161,66	14.5.13.19	89,04
10.3.4.11	44,60	14.5.13.20	31,52
10.3.4.12	79,95	5.13.9.3	3,58
3.4.5.6	74,21	5.13.9.17	118,55
3.4.5.13	44,31	5.13.9.18	122,50
3.4.5.14	163,32	19.13.9.3	124,69
11.4.5.6	168,69	19.13.9.17	2,55
11.4.5.13	72,79	19.13.9.18	116,39
11.4.5.14	46,22	20.13.9.3	114,83
12.4.5.6	44,72	20.13.9.17	123,04
12.4.5.13	163,24	20.13.9.18	4,08
12.4.5.14	77,75	5.6.1.2	7,10
4.5.6.1	33,09	15.6.1.2	116,53
4.5.6.15	156,48	16.6.1.2	128,29
4.5.6.16	87,78	5.6.1.21	172,90
13.5.6.1	81,43	15.6.1.21	63,47
13.5.6.15	41,97	16.6.1.21	51,71

bicyclo (3.2.1) octanone-3
α bromée (Br ax)

34 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions du tableau 8

Energie (kcal/mole)	
Wa	2,680
Wb	10,816
Wd	9,775
Wdp. . . .	3,807
ΣW	27,078
W_L	- 2,063
$\Sigma W+W_L$ . . .	25,015

μ (D)	
C = O	3
C - Br	2,1
μ_D	3,94D

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	$5\ 10^{-3}$ kcal

FIGURE : 198

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,311	0,750	0
3	1,165	2,269	0,169
4	- 0,004	2,757	- 0,705
5	- 1,181	2,272	0,160
6	- 1,311	0,750	0
7 Br	2,489	0,023	1,359
8	1,844	0,546	- 0,964
9	0,759	2,612	1,613
10	2,108	2,780	- 0,114
11	- 0,003	3,842	- 0,798
12	- 0,005	2,293	- 1,690
13	- 0,779	2,663	1,593
14	- 2,125	2,776	- 0,128
15 Br	- 2,483	0,026	1,366
16	- 1,835	0,536	- 0,967
17	1,113	1,866	2,323
18	1,167	3,578	1,906
19	- 1,209	1,986	2,330
20	- 1,124	3,672	1,815
21	- 0,005	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée - isomère cis

34 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ_D	5,08

Angles (d°)			
2.1.6	120,47	16.6.1	108,14
1.2.3	114,15	17.9.3	111,95
2.3.4	108,85	17.9.13	110,84
i	6,30	18.9.3	110,54
i'	5,98	18.9.13	110,38
1.6.5	114,75	19.13.5	111,85
7.2.1	109,95	19.13.9	111,44
7.2.3	110,57	20.13.5	110,22
8.2.1	108,83	20.13.9	110,16
8.2.3	108,63	21.1.6	119,55
9.3.2	110,38	21.1.2	119,99
9.3.4	105,15	9.3.10	111,20
10.3.2	110,31	13.5.14	110,40
10.3.4	110,83	3.9.13	105,04
11.4.3	111,31	9.13.5	105,32
11.4.5	111,29	3.4.5	99,34
12.4.3	112,29	4.5.6	108,57
12.4.5	111,90	13.5.4	104,10
13.5.6	111,78	7.2.8	104,20
14.5.4	111,23	11.4.12	110,32
14.5.6	110,58	15.6.16	104,70
15.6.5	110,32	17.9.18	108,09
15.6.1	109,83	19.13.20	108,26
16.6.5	108,58		

Energie (kcal/mole)	
Wa	4,592
Wb	10,586
Wd	9,098
Wdp. . . .	8,316
ΣW	32,591
W_L	- 4,434
$\Sigma W+W_L$ . . .	28,157

$\Delta\theta_{2.1.6}$	7'
ΔW	4 10^{-2} kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	6,91	13.5.6.16	166,54
6.1.2.7	131,83	14.5.6.1	164,21
6.1.2.8	114,62	14.5.6.15	71,11
21.1.2.3	173,09	14.5.6.16	43,10
21.1.2.7	48,17	2.3.9.13	92,25
21.1.2.8	65,38	2.3.9.17	28,11
1.2.3.4	42,71	2.3.9.18	148,68
1.2.3.9	72,21	4.3.9.13	24,98
1.2.3.10	164,51	4.3.9.17	145,34
7.2.3.4	167,30	4.3.9.18	94,09
7.2.3.9	52,39	10.3.9.13	144,98
7.2.3.10	70,90	10.3.9.17	94,65
8.2.3.4	78,93	10.3.9.18	25,91
8.2.3.9	166,16	6.5.13.9	87,11
8.2.3.10	42,87	6.5.13.19	33,97
2.3.4.11	166,95	6.5.13.20	154,19
2.3.4.12	42,70	4.5.13.9	29,89
9.3.4.5	42,55	4.5.13.19	150,98
9.3.4.11	74,78	4.5.13.20	88,81
9.3.4.12	160,96	14.5.13.9	149,34
10.3.4.5	162,80	14.5.13.19	89,57
10.3.4.11	45,47	14.5.13.20	30,65
10.3.4.12	78,79	5.13.9.3	3,02
3.4.5.6	74,99	5.13.9.17	118,07
3.4.5.13	44,22	5.13.9.18	122,20
3.4.5.14	163,11	19.13.9.3	124,24
11.4.5.6	167,66	19.13.9.17	3,15
11.4.5.13	73,13	19.13.9.18	116,58
11.4.5.14	45,76	20.13.9.3	115,57
12.4.5.6	43,72	20.13.9.17	123,33
12.4.5.13	162,92	20.13.9.18	3,60
12.4.5.14	78,18	5.6.1.2	6,59
4.5.6.1	41,92	15.6.1.2	131,53
4.5.6.15	166,61	16.6.1.2	114,76
4.5.6.16	79,19	5.6.1.21	173,41
13.5.6.1	72,35	15.6.1.21	48,46
13.5.6.15	52,33	16.6.1.21	65,24

FIGURE : 199

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,315	0,743	0
3	1,153	2,269	- 0,062
4	- 0,004	2,599	- 1,022
5	- 1,185	2,271	- 0,091
6	- 1,315	0,743	0
7 Br	2,391	0,210	1,524
8	1,914	0,411	- 0,886
9	0,734	2,867	1,293
10	2,095	2,740	- 0,408
11	0	3,654	- 1,294
12	0,002	1,976	- 1,915
13	- 0,803	2,931	1,245
14	- 2,126	2,719	- 0,466
15 Br	- 2,370	0,232	1,545
16	- 1,912	0,385	- 0,877
17	1,076	2,265	2,133
18	1,151	3,865	1,415
19	- 1,245	2,418	2,098
20	- 1,136	3,968	1,259
21	0,001	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée - isomère cis

34 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br_7	1,9
C - Br_{15}	1,9
μ_D	4,94

Angles (d°)			
2.1.6	121,06	16.6.1	107,90
1.2.3	113,40	17.9.3	112,29
2.3.4	108,50	17.9.13	111,16
i	2,32	18.9.3	110,53
i'	3,40	18.9.13	110,33
1.6.5	114,57	19.13.5	112,40
7.2.1	110,35	19.13.9	111,18
7.2.3	111,29	20.13.5	110,30
8.2.1	108,71	20.13.9	110,14
8.2.3	108,54	21.1.6	119,54
9.3.2	112,27	21.1.2	119,41
9.3.4	105,13	9.3.10	109,95
10.3.2	110,19	13.5.14	109,36
10.3.4	110,69	3.9.13	105,14
11.4.3	111,14	9.13.5	104,86
11.4.5	111,13	3.4.5	98,86
12.4.3	112,63	4.5.6	108,23
12.4.5	112,21	13.5.4	104,08
13.5.6	113,34	7.2.8	104,08
14.5.4	111,16	11.4.12	110,42
14.5.6	110,51	15.6.16	104,46
15.6.5	110,82	17.9.18	107,43
15.6.1	110,12	19.13.20	108,38
16.6.5	108,42		

Energie (kcal/mole)	
Wa	4,518
Wb	11,370
Wd	9,574
Wdp. . . .	7,998
ΣW	33,460
W_L	- 4,320
$\Sigma W+W_L$ . . .	29,141

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2'
ΔW	10^{-2} kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	2,52	13.5.6.16	161,15
6.1.2.7	123,10	14.5.6.1	158,56
6.1.2.8	123,34	14.5.6.15	76,09
21.1.2.3	177,48	14.5.6.16	38,00
21.1.2.7	56,90	2.3.9.13	93,15
21.1.2.8	56,66	2.3.9.17	27,85
1.2.3.4	39,14	2.3.9.18	147,80
1.2.3.9	76,62	4.3.9.13	24,62
1.2.3.10	160,47	4.3.9.17	145,62
7.2.3.4	164,26	4.3.9.18	94,43
7.2.3.9	48,50	10.3.9.13	143,80
7.2.3.10	74,41	10.3.9.17	95,20
8.2.3.4	81,78	10.3.9.18	24,75
8.2.3.9	162,47	6.5.13.9	86,07
8.2.3.10	39,56	6.5.13.19	34,71
2.3.4.11	165,77	6.5.13.20	155,48
2.3.4.12	41,26	4.5.13.9	31,29
9.3.4.5	42,90	4.5.13.19	152,07
9.3.4.11	73,94	4.5.13.20	87,16
9.3.4.12	161,55	14.5.13.9	150,14
10.3.4.5	161,58	14.5.13.19	89,07
10.3.4.11	44,74	14.5.13.20	31,69
10.3.4.12	79,77	5.13.9.3	4,06
3.4.5.6	75,50	5.13.9.17	117,68
3.4.5.13	45,35	5.13.9.18	123,25
3.4.5.14	162,96	19.13.9.3	125,51
11.4.5.6	167,65	19.13.9.17	3,77
11.4.5.13	71,50	19.13.9.18	115,30
11.4.5.14	46,11	20.13.9.3	114,34
12.4.5.6	43,47	20.13.9.17	123,91
12.4.5.13	164,31	20.13.9.18	4,84
12.4.5.14	78,08	5.6.1.2	3,74
4.5.6.1	36,63	15.6.1.2	121,97
4.5.6.15	161,97	16.6.1.2	124,60
4.5.6.16	83,94	5.6.1.21	176,26
13.5.6.1	78,28	15.6.1.21	58,03
13.5.6.15	47,07	16.6.1.21	55,40

FIGURE : 200

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,312	0,748	0
3	1,153	2,268	0,153
4	- 0,014	2,743	- 0,731
5	- 1,185	2,271	0,148
6	- 1,312	0,748	0
7	1,965	0,350	0,818
8 Br	2,258	0,378	- 1,653
9	0,752	2,606	1,600
10	2,093	2,783	- 0,125
11	- 0,012	3,827	- 0,839
12	- 0,017	2,254	- 1,704
13	- 0,786	2,660	1,583
14	- 2,130	2,772	- 0,140
15	- 1,968	0,343	0,813
16 Br	- 2,242	0,355	- 1,656
17	1,108	1,854	2,303
18	1,162	3,571	1,894
19	- 1,210	1,973	2,314
20	- 1,130	3,669	1,805
21	- 0,004	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée - isomère cis

34 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ_D	4,88

Angles (d°)			
2.1.6	120,64	16.6.1	108,45
1.2.3	113,58	17.9.3	111,69
2.3.4	109,08	17.9.13	110,95
i	5,72	18.9.3	110,55
i'	5,53	18.9.13	110,42
1.6.5	114,80	19.13.5	111,66
7.2.1	109,32	19.13.9	111,07
7.2.3	109,80	20.13.5	110,22
8.2.1	109,23	20.13.9	110,20
8.2.3	108,90	21.1.6	119,49
9.3.2	109,79	21.1.2	119,88
9.3.4	105,95	9.3.10	110,79
10.3.2	110,34	13.5.14	110,47
10.3.4	110,78	3.9.13	104,92
11.4.3	111,28	9.13.5	105,12
11.4.5	111,27	3.4.5	98,85
12.4.3	112,14	4.5.6	108,18
12.4.5	111,73	13.5.4	104,94
13.5.6	111,21	7.2.8	105,71
14.5.4	111,22	11.4.12	111,04
14.5.6	110,68	15.6.16	105,39
15.6.5	109,67	17.9.18	108,32
15.6.1	109,28	19.13.20	108,96
16.6.5	108,83		

Energie (kcal/mole)	
Wa	2,851
Wb	10,269
Wd	9,349
Wdp. . . .	7,989
ΣW	30,458
W_L	- 3,034
$\Sigma W+W_L$ . . .	27,424

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	$2\ 10^{-2}$ kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	6,25	13.5.6.16	165,60
6.1.2.7	129,25	14.5.6.1	164,13
6.1.2.8	115,52	14.5.6.15	72,40
21.1.2.3	173,75	14.5.6.16	42,41
21.1.2.7	50,75	2.3.9.13	93,13
21.1.2.8	64,48	2.3.9.17	27,15
1.2.3.4	42,73	2.3.9.18	147,83
1.2.3.9	72,96	4.3.9.13	24,53
1.2.3.10	164,65	4.3.9.17	144,81
7.2.3.4	165,47	4.3.9.18	94,51
7.2.3.9	49,78	10.3.9.13	144,75
7.2.3.10	72,61	10.3.9.17	94,98
8.2.3.4	79,23	10.3.9.18	25,71
8.2.3.9	165,08	6.5.13.9	87,12
8.2.3.10	42,69	6.5.13.19	33,30
2.3.4.11	166,46	6.5.13.20	154,26
2.3.4.12	41,40	4.5.13.9	29,61
9.3.4.5	41,63	4.5.13.19	150,03
9.3.4.11	75,41	4.5.13.20	89,01
9.3.4.12	159,53	14.5.13.9	149,57
10.3.4.5	161,84	14.5.13.19	90,01
10.3.4.11	44,81	14.5.13.20	30,95
10.3.4.12	80,26	5.13.9.3	3,10
3.4.5.6	75,41	5.13.9.17	117,66
3.4.5.13	43,38	5.13.9.18	122,22
3.4.5.14	162,85	19.13.9.3	123,76
11.4.5.6	167,84	19.13.9.17	3,00
11.4.5.13	73,67	19.13.9.18	117,11
11.4.5.14	45,80	20.13.9.3	115,39
12.4.5.6	42,80	20.13.9.17	123,84
12.4.5.13	161,59	20.13.9.18	3,73
12.4.5.14	78,95	5.6.1.2	6,10
4.5.6.1	42,06	15.6.1.2	129,77
4.5.6.15	165,53	16.6.1.2	115,84
4.5.6.16	79,67	5.6.1.21	173,90
13.5.6.1	72,68	15.6.1.21	50,23
13.5.6.15	50,79	16.6.1.21	64,16

FIGURE : 201

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,313	0,746	0
3	1,152	2,267	- 0,145
4	- 0,017	2,557	- 1,103
5	- 1,190	2,270	- 0,149
6	- 1,313	0,746	0
7	1,873	0,512	0,941
8 Br	2,421	0,090	- 1,451
9	0,754	2,879	1,209
10	2,091	2,719	- 0,522
11	- 0,015	3,598	- 1,424
12	- 0,021	1,884	- 1,959
13	- 0,784	2,928	1,182
14	- 2,134	2,703	- 0,534
15	- 1,877	0,502	0,936
16 Br	- 2,407	0,062	- 1,449
17	1,108	2,276	2,044
18	1,164	3,883	1,310
19	- 1,208	2,398	2,033
20	- 1,127	3,961	1,206
21	- 0,003	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée - isomère cis

34 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br_8	1,9
C - Br_{16}	1,9
μ_D	5,08

Angles (d°)			
2.1.6	120,80	16.6.1	108,43
1.2.3	113,46	17.9.3	111,70
2.3.4	108,97	17.9.13	110,87
i	5,42	18.9.3	110,53
i'	5,56	18.9.13	110,42
1.6.5	114,85	19.13.5	111,59
7.2.1	109,34	19.13.9	111,09
7.2.3	109,80	20.13.5	110,21
8.2.1	109,23	20.13.9	110,18
8.2.3	108,89	21.1.6	119,47
9.3.2	109,76	21.1.2	119,73
9.3.4	106,01	9.3.10	110,85
10.3.2	110,37	13.5.14	110,95
10.3.4	110,77	3.9.13	104,81
11.4.3	111,26	9.13.5	105,38
11.4.5	111,26	3.4.5	99,09
12.4.3	112,07	4.5.6	107,85
12.4.5	111,63	13.5.4	104,78
13.5.6	111,22	7.2.8	105,84
14.5.4	111,18	11.4.12	111,03
14.5.6	110,68	15.6.16	105,27
15.6.5	109,70	17.9.18	108,51
15.6.1	109,32	19.13.20	108,79
16.6.5	108,83		

Energie (kcal/mole)	
Wa	2,865
Wb	10,282
Wd	10,092
Wdp. . . .	8,356
ΣW	31,594
W_L	- 2,914
$\Sigma W+W_L$ . . .	28,680

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2"
ΔW	10^{-4} kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	5,91	13.5.6.16	159,85
6.1.2.7	117,02	14.5.6.1	157,78
6.1.2.8	127,59	14.5.6.15	78,65
21.1.2.3	174,09	14.5.6.16	36,04
21.1.2.7	62,98	2.3.9.13	93,22
21.1.2.8	52,41	2.3.9.17	26,89
1.2.3.4	36,57	2.3.9.18	147,81
1.2.3.9	79,12	4.3.9.13	24,33
1.2.3.10	158,41	4.3.9.17	144,44
7.2.3.4	159,24	4.3.9.18	94,64
7.2.3.9	43,56	10.3.9.13	144,59
7.2.3.10	78,91	10.3.9.17	95,29
8.2.3.4	85,30	10.3.9.18	25,62
8.2.3.9	159,01	6.5.13.9	86,87
8.2.3.10	36,54	6.5.13.19	33,69
2.3.4.11	166,18	6.5.13.20	154,39
2.3.4.12	41,20	4.5.13.9	29,39
9.3.4.5	41,40	4.5.13.19	149,95
9.3.4.11	75,75	4.5.13.20	89,35
9.3.4.12	159,27	14.5.13.9	149,46
10.3.4.5	161,72	14.5.13.19	89,98
10.3.4.11	44,57	14.5.13.20	30,72
10.3.4.12	80,40	5.13.9.3	3,11
3.4.5.6	75,52	5.13.9.17	117,56
3.4.5.13	43,05	5.13.9.18	122,15
3.4.5.14	162,97	19.13.9.3	123,86
11.4.5.6	167,33	19.13.9.17	3,19
11.4.5.13	74,10	19.13.9.18	117,10
11.4.5.14	45,82	20.13.9.3	115,51
12.4.5.6	42,69	20.13.9.17	123,82
12.4.5.13	161,26	20.13.9.18	3,53
12.4.5.14	78,82	5.6.1.2	6,13
4.5.6.1	35,95	15.6.1.2	117,65
4.5.6.15	159,53	16.6.1.2	128,08
4.5.6.16	85,78	5.6.1.21	173,87
13.5.6.1	78,41	15.6.1.21	62,35
13.5.6.15	45,17	16.6.1.21	51,92

FIGURE : 202

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,286	0,792	0
3	1,175	2,001	- 0,941
4	0,768	1,559	- 2,357
5	- 0,768	1,559	- 2,357
6	- 1,175	2,001	- 0,941
7	- 1,286	0,792	0
8	0	2,880	- 0,476
9	1,485	1,159	1,039
10 Br	2,800	- 0,326	- 0,469
11	2,124	2,574	- 0,962
12	1,136	2,278	- 3,088
13	1,178	0,584	- 2,616
14	- 1,136	2,278	- 3,088
15	- 1,178	0,584	- 2,616
16	- 2,124	2,578	- 0,962
17	- 1,485	1,159	1,039
18 Br	- 2,800	- 0,326	- 0,469
19	0	3,049	0,600
20	0	3,831	- 1,006
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	116,71
1.2.3	110,61
2.3.4	110,88
13.4.5	112,11
2.3.8	108,61
3.8.6	99,58
1.2.9	108,86
1.2.10	111,22
11.3.4	110,93
20.8.3	110,59
19.8.20	110,19
12.4.5	109,77
3.4.5	105,35
4.3.8	103,88
8.3.11	111,39
12.4.13	107,73
9.2.10	105,91
19.8.3	112,76
21.1.2	121,64

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	101,30
21.1.2.3	139,14
21.1.2.10	15,03
7.1.2.9	78,70
7.1.2.3	40,86
7.1.2.10	164,97
10.2.3.11	54,63
10.2.3.8	177,36
10.2.3.4	69,10
9.2.3.11	61,70
9.2.3.8	61,04
9.2.3.4	174,57
1.2.3.11	178,74
1.2.3.8	58,53
1.2.3.4	55,01
11.3.4.12	29,59
11.3.4.5	147,71
11.3.4.13	90,10
8.3.4.12	90,19
8.3.4.5	27,93
8.3.4.13	150,12
2.3.4.12	153,32
2.3.4.5	88,56
2.3.4.13	33,63
4.3.8.19	164,15
4.3.8.20	71,98
4.3.8.6	44,40
11.3.8.19	76,39
11.3.8.20	47,49
11.3.8.6	163,87
2.3.8.19	46,07
2.3.8.20	169,95
2.3.8.6	73,68
13.4.5.14	119,69
13.4.5.6	122,19
12.4.5.15	119,69
12.4.5.6	118,12
3.4.5.15	122,19
3.4.5.14	118,12

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	4,151
Wb . .	9,515
Wd . .	6,654
Wdp. .	8,881
ΣW	29,200
W_L . .	- 2,963
$\Sigma W+W_L$.	26,238

$\Delta\theta_{2.1.7}$	4'
ΔW	$2\ 10^{-3}$ kcal

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ	5,17

FIGURE : 203

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,304	0,761	0
3	1,159	2,289	0,029
4	0,768	2,840	- 1,354
5	- 0,768	2,840	- 1,354
6	- 1,159	2,289	0,029
7	- 1,304	0,761	0
8	0	2,676	0,965
9	1,916	0,436	0,881
10 Br	2,396	0,220	- 1,510
11	2,105	2,754	0,369
12	1,142	3,856	- 1,472
13	1,184	2,250	- 2,169
14	- 1,142	3,856	- 1,472
15	- 1,184	2,250	- 2,169
16	- 2,105	2,754	0,369
17	- 1,916	0,436	0,881
18 Br	- 2,396	0,220	- 1,510
19	0	2,113	1,897
20	0	3,747	1,161
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	119,51
1.2.3	114,79
2.3.4	111,31
13.4.5	112,45
2.3.8	109,44
3.8.6	97,69
1.2.9	109,01
1.2.10	110,22
11.3.4	110,01
20.8.3	110,88
19.8.20	110,77
12.4.5	110,09
3.4.5	104,71
4.3.8	105,40
8.3.11	110,58
12.4.13	107,07
9.2.10	102,92
19.8.3	113,01
21.1.2	120,24

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	56,24
21.1.2.3	178,82
21.1.2.10	56,03
7.1.2.9	123,76
7.1.2.3	1,18
7.1.2.10	123,97
10.2.3.11	73,97
10.2.3.8	164,34
10.2.3.4	48,24
9.2.3.11	38,29
9.2.3.8	38,39
9.2.3.4	160,51
1.2.3.11	160,87
1.2.3.8	39,19
1.2.3.4	76,92
11.3.4.12	29,31
11.3.4.5	147,62
11.3.4.13	89,99
8.3.4.12	89,92
8.3.4.5	28,39
8.3.4.13	150,77
2.3.4.12	151,52
2.3.4.5	90,17
2.3.4.13	32,22
4.3.8.19	163,40
4.3.8.20	71,54
4.3.8.6	44,33
11.3.8.19	77,73
11.3.8.20	47,32
11.3.8.6	163,19
2.3.8.19	43,61
2.3.8.20	168,66
2.3.8.6	75,47
13.4.5.14	119,30
13.4.5.6	122,39
12.4.5.15	119,30
12.4.5.6	118,31
3.4.5.15	122,39
3.4.5.14	118,31

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	6,521
Wb . .	11,138
Wd . .	9,134
Wdp. .	8,026
ΣW	34,819
W_L . .	- 4,870
$\Sigma W+W_L$.	29,949

$\Delta\theta_{2.1.7}$	20"
ΔW	0,2 kcal

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ	4,94

FIGURE : 204

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,298	0,772	0
3	1,171	2,175	- 0,612
4	0,768	2,104	- 2,096
5	- 0,768	2,104	- 2,096
6	- 1,171	2,175	- 0,612
7	- 1,298	0,772	0
8	0	2,907	0,066
9	1,646	0,879	1,059
10 Br	2,696	- 0,239	- 0,888
11	2,120	2,736	- 0,495
12	1,136	2,985	- 2,620
13	1,180	1,228	- 2,594
14	- 1,136	2,985	- 2,620
15	- 1,180	1,228	- 2,594
16	- 2,120	2,736	- 0,495
17	- 1,646	0,879	1,059
18 Br	- 2,696	- 0,239	- 0,888
19	0	2,798	1,149
20	0	3,963	- 0,200
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	118,49
1.2.3	113,36
2.3.4	111,33
13.4.5	112,25
2.3.8	108,75
3.8.6	99,14
1.2.9	108,40
1.2.10	110,66
11.3.4	110,49
20.8.3	110,72
19.8.20	109,90
12.4.5	109,75
3.4.5	105,20
4.3.8	104,31
8.3.11	111,32
12.4.13	107,63
9.2.10	104,98
19.8.3	112,99
21.1.2	120,75

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	85,34
21.1.2.3	154,27
21.1.2.10	29,27
7.1.2.9	94,66
7.1.2.3	25,73
7.1.2.10	150,73
10.2.3.11	60,81
10.2.3.8	176,73
10.2.3.4	62,36
9.2.3.11	53,80
9.2.3.8	68,66
9.2.3.4	176,97
1.2.3.11	174,20
1.2.3.8	51,74
1.2.3.4	62,64
11.3.4.12	29,67
11.3.4.5	147,67
11.3.4.13	89,98
8.3.4.12	90,06
8.3.4.5	27,95
8.3.4.13	150,30
2.3.4.12	152,83
2.3.4.5	89,16
2.3.4.13	33,19
4.3.8.19	164,10
4.3.8.20	72,14
4.3.8.6	44,23
11.3.8.19	76,74
11.3.8.20	47,03
11.3.8.6	163,39
2.3.8.19	45,22
2.3.8.20	168,98
2.3.8.6	74,65
13.4.5.14	119,65
13.4.5.6	122,35
12.4.5.15	119,65
12.4.5.6	118,01
3.4.5.15	122,35
3.4.5.14	118,01

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	4,288
Wb . .	10,027
Wd . .	7,965
Wdp. .	7,000
ΣW	29,279
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2'
ΔW	$5\ 10^{-4}$ kcal

FIGURE : 205

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal chaise

paramètre de torsion B*

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br	1,7

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,305	0,760	0
3	1,158	2,289	0,013
4	0,768	2,821	- 1,378
5	- 0,768	2,821	- 1,378
6	- 1,158	2,289	0,013
7	- 1,305	0,760	0
8	0	2,685	0,945
9	1,912	0,444	0,883
10 Br	2,391	0,212	- 1,511
11	2,105	2,758	0,347
12	1,143	3,835	- 1,510
13	1,181	2,215	- 2,183
14	- 1,143	3,835	- 1,510
15	- 1,181	2,215	- 2,183
16	- 2,105	2,758	0,347
17	- 1,912	0,444	0,883
18 Br	- 2,391	0,212	- 1,511
19	0	2,131	1,883
20	0	3,759	1,131
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	119,52
1.2.3	114,78
2.3.4	111,12
13.4.5	112,30
2.3.8	109,44
3.8.6	97,65
1.2.9	109,05
1.2.10	109,97
11.3.4	110,03
20.8.3	110,89
19.8.20	110,79
12.4.5	110,13
3.4.5	104,70
4.3.8	105,53
8.3.11	110,60
12.4.13	107,32
9.2.10	103,32
19.8.3	113,01
21.1.2	120,24

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	56,72
21.1.2.3	179,50
21.1.2.10	55,93
7.1.2.9	123,28
7.1.2.3	0,51
7.1.2.10	124,07
10.2.3.11	74,13
10.2.3.8	164,14
10.2.3.4	48,00
9.2.3.11	38,52
9.2.3.8	83,20
9.2.3.4	160,65
1.2.3.11	161,27
1.2.3.8	39,54
1.2.3.4	76,60
11.3.4.12	29,28
11.3.4.5	147,64
11.3.4.13	92,25
8.3.4.12	90,07
8.3.4.5	28,29
8.3.4.13	150,40
2.3.4.12	151,41
2.3.4.5	90,24
2.3.4.13	31,87
4.3.8.19	163,18
4.3.8.20	71,74
4.3.8.6	44,14
11.3.8.19	77,84
11.3.8.20	47,24
11.3.8.6	163,12
2.3.8.19	43,54
2.3.8.20	168,62
2.3.8.6	75,50
13.4.5.14	119,53
13.4.5.6	122,11
12.4.5.15	119,53
12.4.5.6	118,36
3.4.5.15	122,11
3.4.5.14	118,36

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	6,847
Wb . .	10,948
Wd . .	7,666
Wdp. .	8,568
ΣW	34,030
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	7'
ΔW	0,5 kcal

FIGURE : 206

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal bateau

paramètres de torsion B*

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	1,9

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,281	0,800	0
3	1,178	1,996	- 0,958
4	0,768	1,517	- 2,362
5	- 0,768	1,517	- 2,362
6	- 1,178	1,996	- 0,958
7	- 1,281	0,800	0
8	0	2,882	- 0,516
9	1,455	1,190	1,036
10 Br	2,808	- 0,317	- 0,429
11	2,117	2,585	- 0,983
12	1,164	2,172	- 3,136
13	1,183	0,540	- 2,605
14	- 1,164	2,172	- 3,136
15	- 1,183	0,540	- 2,605
16	- 2,117	2,585	- 0,983
17	- 1,455	1,190	1,036
18 Br	- 2,808	- 0,317	- 0,429
19	0	3,076	0,555
20	0	3,823	- 1,064
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	116,02
1.2.3	110,86
2.3.4	110,12
13.4.5	112,41
2.3.8	108,69
3.8.6	99,94
1.2.9	108,42
1.2.10	111,27
11.3.4	111,78
20.8.3	110,68
19.8.20	109,96
12.4.5	111,34
3.4.5	105,47
4.3.8	103,70
8.3.11	110,45
12.4.13	104,03
9.2.10	106,40
19.8.3	112,63
21.1.2	121,99

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	102,96
21.1.2.3	138,13
21.1.2.10	137,31
7.1.2.9	77,04
7.1.2.3	41,87
7.1.2.10	166,27
10.2.3.11	54,64
10.2.3.8	176,80
10.2.3.4	70,23
9.2.3.11	62,04
9.2.3.8	60,11
9.2.3.4	173,08
1.2.3.11	179,05
1.2.3.8	58,80
1.2.3.4	54,17
11.3.4.12	25,81
11.3.4.5	146,71
11.3.4.13	90,46
8.3.4.12	93,17
8.3.4.5	27,73
8.3.4.13	150,56
2.3.4.12	150,69
2.3.4.5	88,41
2.3.4.13	34,42
4.3.8.19	163,95
4.3.8.20	72,50
4.3.8.6	44,21
11.3.8.19	76,15
11.3.8.20	47,39
11.3.8.6	164,10
2.3.8.19	46,81
2.3.8.20	170,36
2.3.8.6	72,94
13.4.5.14	116,28
13.4.5.6	122,83
12.4.5.15	116,28
12.4.5.6	120,90
3.4.5.15	122,83
3.4.5.14	120,90

bicyclo (3.2.1) octanone-3

αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal chaise

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ	5,16

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	1,092
Wb . .	10,123
Wd . .	6,770
Wdp. .	8,870
ΣW	26,855
W_L . .	- 2,919
$\Sigma W+W_L$.	23,936

fonctions :

C---C $16600e^{-4,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

$\Delta\theta_{2.1.7}$	20"
ΔW	2.10^{-3} kcal

FIGURE : 207

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,305	0,759	0
3	1,159	2,288	0,0061
4	0,768	2,816	- 1,386
5	- 0,768	2,816	- 1,386
6	- 1,159	2,288	0,0061
7	- 1,305	0,759	0
8	0	2,689	0,936
9	1,911	0,446	0,896
10 Br	2,406	0,198	- 1,495
11	2,102	2,762	0,344
12	1,148	3,826	- 1,529
13	1,186	2,216	- 2,193
14	- 1,148	3,826	- 1,529
15	- 1,186	2,216	- 2,193
16	- 2,102	2,762	0,344
17	- 1,911	0,446	0,896
18 Br	- 2,406	0,198	- 1,495
19	0	2,139	1,877
20	0	3,763	1,117
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	119,61
1.2.3	114,73
2.3.4	111,20
13.4.5	112,58
2.3.8	109,45
3.8.6	97,70
1.2.9	109,08
1.2.10	110,19
11.3.4	110,20
20.8.3	110,89
19.8.20	110,77
12.4.5	110,40
3.4.5	104,71
4.3.8	105,45
8.3.11	110,22
12.4.13	106,24
9.2.10	103,14
19.8.3	112,99
21.1.2	120,19

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	57,28
21.1.2.3	179,80
21.1.2.10	55,21
7.1.2.9	122,72
7.1.2.3	0,21
7.1.2.10	124,79
10.2.3.11	73,92
10.2.3.8	164,71
10.2.3.4	48,60
9.2.3.11	38,57
9.2.3.8	82,80
9.2.3.4	161,09
1.2.3.11	161,04
1.2.3.8	39,66
1.2.3.4	76,45
11.3.4.12	28,44
11.3.4.5	147,27
11.3.4.13	90,10
8.3.4.12	90,50
8.3.4.5	28,32
8.3.4.13	150,96
2.3.4.12	150,96
2.3.4.5	90,22
2.3.4.13	32,41
4.3.8.19	163,27
4.3.8.20	71,68
4.3.8.6	44,22
11.3.8.19	77,80
11.3.8.20	47,25
11.3.8.6	163,15
2.3.8.19	43,56
2.3.8.20	168,62
2.3.8.6	75,49
13.4.5.14	118,54
13.4.5.6	122,63
12.4.5.15	118,54
12.4.5.6	118,83
3.4.5.15	122,63
3.4.5.14	118,83

bicyclo (3.2.1) octanone-3

αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal bateau

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ	4,96

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	4,791
Wb . .	11,152
Wd . .	9,133
Wdp. .	8,055
ΣW	33,131
W_L . .	- 4,832
$\Sigma W+W_L$.	28,298

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

$\Delta\theta_{2.1.7}$	20"
ΔW	0,2 kcal

FIGURE : 208

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,293	0,779	0
3	1,171	2,143	- 0,696
4	0,768	1,967	- 2,171
5	- 0,768	1,967	- 2,171
6	- 1,171	2,143	- 0,696
7	- 1,293	0,779	0
8	0	2,919	- 0,067
9	1,602	0,952	1,063
10 Br	2,722	- 0,267	- 0,793
11	2,109	2,724	- 0,605
12	1,162	2,775	- 2,786
13	1,187	1,065	- 2,615
14	- 1,162	2,775	- 2,786
15	- 1,187	1,065	- 2,615
16	- 2,109	2,724	- 0,605
17	- 1,602	0,952	1,063
18 Br	- 2,722	- 0,267	- 0,793
19	0	2,871	1,020
20	0	3,955	- 0,404
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	117,86
1.2.3	112,94
2.3.4	110,72
13.4.5	112,64
2.3.8	108,86
3.8.6	99,05
1.2.9	108,39
1.2.10	110,62
11.3.4	111,16
20.8.3	110,68
19.8.20	110,57
12.4.5	111,19
3.4.5	105,17
4.3.8	104,49
8.3.11	110,24
12.4.13	104,17
9.2.10	105,55
19.8.3	112,69
21.1.2	121,07

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	89,38
21.1.2.3	150,51
21.1.2.10	25,90
7.1.2.9	90,62
7.1.2.3	29,49
7.1.2.10	154,10
10.2.3.11	60,19
10.2.3.8	178,20
10.2.3.4	63,88
9.2.3.11	55,09
9.2.3.8	66,52
9.2.3.4	179,16
1.2.3.11	175,21
1.2.3.8	53,59
1.2.3.4	60,73
11.3.4.12	26,29
11.3.4.5	146,75
11.3.4.13	90,21
8.3.4.12	92,61
8.3.4.5	27,85
8.3.4.13	150,89
2.3.4.12	150,35
2.3.4.5	89,19
2.3.4.13	33,85
4.3.8.19	163,35
4.3.8.20	72,26
4.3.8.6	44,00
11.3.8.19	77,14
11.3.8.20	47,25
11.3.8.6	163,51
2.3.8.19	45,03
2.3.8.20	169,42
2.3.8.6	74,32
13.4.5.14	116,50
13.4.5.6	123,04
12.4.5.15	116,50
12.4.5.6	120,46
3.4.5.15	123,04
3.4.5.14	120,46

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	1,451
Wb . .	10,240
Wd . .	8,399
Wdp. .	7,061
ΣW	27,150
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2'
ΔW	10^{-2} kcal

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal chaise

paramètres de torsion B*

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br	1,7

FIGURE : 209

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,305	0,760	0
3	1,158	2,289	0,036
4	0,768	2,840	- 1,347
5	- 0,768	2,840	- 1,347
6	- 1,158	2,289	0,036
7	- 1,305	0,760	0
8	0	2,671	0,975
9	1,922	0,430	0,875
10 Br	2,376	0,235	- 1,530
11	2,103	2,755	0,380
12	1,146	3,854	- 1,470
13	1,184	2,249	- 2,162
14	- 1,146	3,854	- 1,470
15	- 1,184	2,249	- 2,162
16	- 2,103	2,755	0,380
17	- 1,922	0,430	0,875
18 Br	- 2,376	0,235	- 1,530
19	0	2,103	1,904
20	0	3,741	1,176
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	119,54
1.2.3	114,75
2.3.4	111,07
13.4.5	112,44
2.3.8	109,46
3.8.6	97,62
1.2.9	109,12
1.2.10	109,92
11.3.4	110,15
20.8.3	110,90
19.8.20	110,79
12.4.5	110,31
3.4.5	104,69
4.3.8	105,57
8.3.11	110,34
12.4.13	106,72
9.2.10	103,42
19.8.3	113,01
21.1.2	120,23

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	55,75
21.1.2.3	178,53
21.1.2.10	57,01
7.1.2.9	124,25
7.1.2.3	1,47
7.1.2.10	122,99
10.2.3.11	74,95
10.2.3.8	163,55
10.2.3.4	47,37
9.2.3.11	37,80
9.2.3.8	83,69
9.2.3.4	160,13
1.2.3.11	160,58
1.2.3.8	39,08
1.2.3.4	77,10
11.3.4.12	28,76
11.3.4.5	147,41
11.3.4.13	90,24
8.3.4.12	90,37
8.3.4.5	28,28
8.3.4.13	150,64
2.3.4.12	151,08
2.3.4.5	90,27
2.3.4.13	32,08
4.3.8.19	163,15
4.3.8.20	71,76
4.3.8.6	44,11
11.3.8.19	77,85
11.3.8.20	47,24
11.3.8.6	163,11
2.3.8.19	43,52
2.3.8.20	168,62
2.3.8.6	75,51
13.4.5.14	119,00
13.4.5.6	122,35
12.4.5.15	119,00
12.4.5.6	118,65
3.4.5.15	122,35
3.4.5.14	118,65

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	5,573
Wb . .	10,982
Wd . .	7,754
Wdp. .	8,542
ΣW	32,851
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	0,1 kcal

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal bateau

paramètres de torsion B*

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4Å$

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4Å$

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	1,9

FIGURE : 210

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,290	0,785	0
3	1,173	2,061	- 0,846
4	0,768	1,708	- 2,288
5	- 0,768	1,708	- 2,288
6	- 1,173	2,061	- 0,846
7	- 1,290	0,785	0
8	0	2,913	- 0,329
9 Br	1,858	1,195	1,809
10	2,101	0,142	- 0,429
11	2,126	2,627	- 0,835
12	1,137	2,470	- 2,973
13	1,176	0,749	- 2,604
14	- 1,137	2,470	- 2,973
15	- 1,176	0,749	- 2,604
16	- 2,126	2,627	- 0,835
17 Br	- 1,858	1,195	1,809
18	- 2,101	0,142	- 0,429
19	0	3,026	0,754
20	0	3,892	- 0,805
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	117,39
1.2.3	111,53
2.3.4	110,20
13.4.5	112,02
2.3.8	109,44
3.8.6	99,35
1.2.9	111,10
1.2.10	108,71
11.3.4	110,68
20.8.3	110,54
19.8.20	109,96
12.4.5	109,82
3.4.5	105,27
4.3.8	103,94
8.3.11	111,72
12.4.13	107,88
9.2.10	105,46
19.8.3	113,04
21.1.2	121,31

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	91,76
21.1.2.3	143,70
21.1.2.10	23,86
7.1.2.9	88,24
7.1.2.3	36,30
7.1.2.10	156,14
10.2.3.11	60,26
10.2.3.8	176,20
10.2.3.4	62,49
9.2.3.11	55,36
9.2.3.8	68,19
9.2.3.4	178,10
1.2.3.11	180,00
1.2.3.8	56,35
1.2.3.4	57,35
11.3.4.12	30,03
11.3.4.5	148,19
11.3.4.13	89,82
8.3.4.12	90,05
8.3.4.5	28,11
8.3.4.13	150,10
2.3.4.12	152,78
2.3.4.5	89,06
2.3.4.13	32,92
4.3.8.19	164,70
4.3.8.20	71,57
4.3.8.6	44,63
11.3.8.19	75,94
11.3.8.20	47,80
11.3.8.6	164,00
2.3.8.19	47,00
2.3.8.20	170,73
2.3.8.6	73,07
13.4.5.14	119,85
13.4.5.6	121,98
12.4.5.15	119,85
12.4.5.6	118,17
3.4.5.15	121,98
3.4.5.14	118,17

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	4,438
Wb . .	9,623
Wd . .	6,865
Wdp. .	7,361
ΣW	28,286
W_L . .	- 3,002
$\Sigma W+W_L$.	25,285

$\Delta\theta_{2.1.7}$	1"
ΔW	$2\ 10^{-5}$kcal

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ	4,12D

FIGURE : 211

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,306	0,758	0
3	1,161	2,287	0,013
4	0,768	2,810	- 1,380
5	- 0,768	2,810	- 1,380
6	- 1,161	2,287	0,013
7	- 1,306	0,758	0
8	0	2,684	0,942
9 Br	2,365	0,205	1,529
10	1,918	0,448	- 0,884
11	2,111	2,754	0,338
12	1,141	3,824	- 1,517
13	1,180	2,198	- 2,181
14	- 1,141	3,824	- 1,517
15	- 1,180	2,198	- 2,181
16	- 2,111	2,754	0,338
17 Br	- 2,365	0,205	1,529
18	- 1,918	0,448	- 0,884
19	0	2,133	1,882
20	0	3,757	1,127
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	119,73
1.2.3	114,71
2.3.4	110,79
13.4.5	112,22
2.3.8	109,44
3.8.6	97,93
1.2.9	109,20
1.2.10	109,50
11.3.4	109,95
20.8.3	110,90
19.8.20	110,59
12.4.5	110,03
3.4.5	104,79
4.3.8	105,45
8.3.11	111,17
12.4.13	107,55
9.2.10	104,16
19.8.3	112,98
21.1.2	120,13

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	56,54
21.1.2.3	179,49
21.1.2.10	56,94
7.1.2.9	123,46
7.1.2.3	0,49
7.1.2.10	123,06
10.2.3.11	74,65
10.2.3.8	162,97
10.2.3.4	47,11
9.2.3.11	38,82
9.2.3.8	83,56
9.2.3.4	160,58
1.2.3.11	161,76
1.2.3.8	39,37
1.2.3.4	76,48
11.3.4.12	29,76
11.3.4.5	148,01
11.3.4.13	89,96
8.3.4.12	90,18
8.3.4.5	28,07
8.3.4.13	150,10
2.3.4.12	151,51
2.3.4.5	90,24
2.3.4.13	31,79
4.3.8.19	163,04
4.3.8.20	72,16
4.3.8.6	43,87
11.3.8.19	77,82
11.3.8.20	46,98
11.3.8.6	163,01
2.3.8.19	43,83
2.3.8.20	168,63
2.3.8.6	75,34
13.4.5.14	119,72
13.4.5.6	122,03
12.4.5.15	119,72
12.4.5.6	118,25
3.4.5.15	122,03
3.4.5.14	118,25

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	3,765
Wb . .	10,695
Wd . .	9,180
Wdp. .	8,153
ΣW	31,792
W_L . .	- 2,827
$\Sigma W+W_L$.	28,965

$\Delta\theta_{2.1.7}$	1"
ΔW	$5\ 10^{-2}$kcal

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ	4,98D

FIGURE : 212

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,285	0,793	0
3	1,166	2,081	- 0,828
4	0,768	1,732	- 2,273
5	- 0,768	1,732	- 2,273
6	- 1,166	2,081	- 0,828
7	- 1,285	0,793	0
8	0	2,939	- 0,305
9 Br	1,854	1,187	1,812
10	2,091	0,159	- 0,449
11	2,110	2,662	- 0,803
12	1,160	2,466	- 2,976
13	1,190	0,786	- 2,610
14	- 1,160	2,466	- 2,976
15	- 1,190	0,786	- 2,610
16	- 2,110	2,662	- 0,803
17 Br	- 1,854	1,187	1,812
18	- 2,091	0,159	- 0,449
19	0	3,050	0,778
20	0	3,917	- 0,785
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	116,60
1.2.3	112,01
2.3.4	109,63
13.4.5	112,77
2.3.8	110,02
3.8.6	98,50
1.2.9	110,87
1.2.10	108,34
11.3.4	111,15
20.8.3	110,51
19.8.20	110,29
12.4.5	111,09
3.4.5	104,98
4.3.8	104,48
8.3.11	110,22
12.4.13	104,30
9.2.10	106,16
19.8.3	113,27
21.1.2	121,70

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	91,14
21.1.2.3	144,43
21.1.2.10	24,98
7.1.2.9	88,86
7.1.2.3	35,57
7.1.2.10	155,02
10.2.3.11	61,63
10.2.3.8	176,00
10.2.3.4	61,64
9.2.3.11	54,48
9.2.3.8	67,88
9.2.3.4	177,76
1.2.3.11	178,92
1.2.3.8	56,55
1.2.3.4	57,81
11.3.4.12	27,16
11.3.4.5	147,32
11.3.4.13	89,52
8.3.4.12	91,69
8.3.4.5	28,47
8.3.4.13	151,63
2.3.4.12	150,44
2.3.4.5	89,40
2.3.4.13	33,76
4.3.8.19	164,82
4.3.8.20	70,86
4.3.8.6	44,87
11.3.8.19	75,70
11.3.8.20	48,62
11.3.8.6	164,35
2.3.8.19	47,21
2.3.8.20	171,54
2.3.8.6	72,74
13.4.5.14	116,68
13.4.5.6	123,16
12.4.5.15	116,68
12.4.5.6	120,16
3.4.5.15	123,16
3.4.5.14	120,16

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4$Å

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4$Å

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ	4,14

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	1,518
Wb . .	10,344
Wd . .	6,937
Wdp. .	7,396
ΣW	26,196
W_L . .	- 2,978
$\Sigma W + W_L$.	23,218

$\Delta\theta_{2.1.7}$	7'
ΔW	10^{-2} kcal

FIGURE : 213

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,305	0,760	0
3	1,160	2,289	0,032
4	0,768	2,844	- 1,350
5	- 0,768	2,844	- 1,350
6	- 1,160	2,289	0,032
7	- 1,305	0,760	0
8	0	2,676	0,966
9 Br	2,372	0,191	1,517
10	1,922	0,455	- 0,884
11	2,103	2,756	0,379
12	1,151	3,855	- 1,479
13	1,193	2,271	- 2,173
14	- 1,151	3,855	- 1,479
15	- 1,193	2,271	- 2,173
16	- 2,103	2,756	0,379
17 Br	- 2,372	0,191	1,517
18	- 1,922	0,455	- 0,884
19	0	2,113	1,899
20	0	3,747	1,162
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	119,54
1.2.3	114,81
2.3.4	111,37
13.4.5	112,95
2.3.8	109,50
3.8.6	97,79
1.2.9	109,13
1.2.10	109,83
11.3.4	110,22
20.8.3	110,88
19.8.20	110,76
12.4.5	110,60
3.4.5	104,74
4.3.8	105,23
8.3.11	110,18
12.4.13	105,12
9.2.10	103,51
19.8.3	112,96
21.1.2	120,23

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	55,85
21.1.2.3	178,71
21.1.2.10	56,98
7.1.2.9	124,15
7.1.2.3	1,29
7.1.2.10	123,02
10.2.3.11	75,28
10.2.3.8	163,36
10.2.3.4	47,39
9.2.3.11	37,55
9.2.3.8	83,81
9.2.3.4	160,22
1.2.3.11	160,41
1.2.3.8	39,04
1.2.3.4	76,92
11.3.4.12	28,04
11.3.4.5	147,23
11.3.4.13	89,46
8.3.4.12	90,73
8.3.4.5	28,45
8.3.4.13	151,77
2.3.4.12	150,71
2.3.4.5	90,11
2.3.4.13	33,21
4.3.8.19	163,55
4.3.8.20	71,44
4.3.8.6	44,49
11.3.8.19	77,64
11.3.8.20	47,37
11.3.8.6	163,30
2.3.8.19	43,75
2.3.8.20	168,76
2.3.8.6	75,31
13.4.5.14	117,50
13.4.5.6	123,32
12.4.5.15	117,50
12.4.5.6	119,18
3.4.5.15	123,32
3.4.5.14	119,18

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ $r \geq 2,4$Å

$- 10,162r + 24,29$ $r < 2,4$Å

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br	1,9
μ	4,99

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	2,320
Wb . .	11,360
Wd . .	9,194
Wdp. .	8,181
ΣW	31,056
W_L . .	- 2,834
$\Sigma W + W_L$.	28,222

$\Delta\theta_{2.1.7}$	20"
ΔW	0,1 kcal

FIGURE : 214

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,301	0,767	0
3	1,171	2,206	- 0,521
4	0,768	2,203	- 2,007
5	- 0,768	2,203	- 2,007
6	- 1,171	2,206	- 0,521
7	- 1,301	0,767	0
8	0	2,905	0,192
9 Br	2,080	0,765	1,777
10	2,034	0,221	- 0,647
11	2,121	2,757	- 0,378
12	1,137	3,105	- 2,491
13	1,179	1,348	- 2,542
14	- 1,137	3,105	- 2,491
15	- 1,179	1,348	- 2,542
16	- 2,121	2,757	- 0,378
17 Br	- 2,080	0,765	1,777
18	- 2,034	0,221	- 0,647
19	0	2,742	1,269
20	0	3,973	- 0,024
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	118,97
1.2.3	113,74
2.3.4	110,36
13.4.5	112,18
2.3.8	109,46
3.8.6	99,04
1.2.9	110,22
1.2.10	108,43
11.3.4	110,48
20.8.3	110,73
19.8.20	110,01
12.4.5	109,82
3.4.5	105,17
4.3.8	104,42
8.3.11	111,48
12.4.13	107,67
9.2.10	105,43
19.8.3	112,96
21.1.2	120,52

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	77,41
21.1.2.3	158,24
21.1.2.10	37,53
7.1.2.9	102,59
7.1.2.3	21,76
7.1.2.10	142,47
10.2.3.11	66,50
10.2.3.8	170,38
10.2.3.4	55,99
9.2.3.11	48,44
9.2.3.8	74,69
9.2.3.4	170,93
1.2.3.11	172,80
1.2.3.8	49,67
1.2.3.4	64,72
11.3.4.12	29,80
11.3.4.5	147,91
11.3.4.13	89,89
8.3.4.12	90,17
8.3.4.5	27,93
8.3.4.13	150,13
2.3.4.12	152,29
2.3.4.5	89,60
2.3.4.13	32,59
4.3.8.19	163,92
4.3.8.20	72,18
4.3.8.6	44,15
11.3.8.19	76,78
11.3.8.20	47,12
11.3.8.6	163,46
2.3.8.19	45,76
2.3.8.20	169,66
2.3.8.6	74,07
13.4.5.14	119,69
13.4.5.6	122,20
12.4.5.15	119,69
12.4.5.6	118,11
3.4.5.15	122,20
3.4.5.14	118,11

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	3,905
Wb . .	10,018
Wd . .	7,556
Wdp. .	8,001
ΣW	29,481
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	1"
ΔW	10^{-3} kcal

FIGURE : 215

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal chaise

paramètres de torsion B*

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	1,9

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,305	0,760	0
3	1,158	2,289	0,013
4	0,768	2,810	- 1,381
5	- 0,768	2,810	- 1,381
6	- 1,158	2,289	0,013
7	- 1,305	0,760	0
8	0	2,685	0,946
9 Br	2,359	0,210	1,533
10	1,910	0,455	- 0,892
11	2,107	2,758	0,341
12	1,142	3,823	- 1,521
13	1,177	2,191	- 2,178
14	- 1,142	3,823	- 1,521
15	- 1,177	2,191	- 2,178
16	- 2,107	2,758	0,341
17 Br	- 2,359	0,210	1,533
18	- 1,910	0,455	- 0,892
19	0	2,132	1,884
20	0	3,758	1,131
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	119,57
1.2.3	114,73
2.3.4	110,70
13.4.5	112,05
2.3.8	109,47
3.8.6	97,62
1.2.9	109,10
1.2.10	109,26
11.3.4	110,00
20.8.3	110,88
19.8.20	110,77
12.4.5	110,11
3.4.5	104,69
4.3.8	105,74
8.3.11	110,85
12.4.13	107,84
9.2.10	104,95
19.8.3	113,04
21.1.2	120,21

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	56,73
21.1.2.3	179,48
21.1.2.10	57,48
7.1.2.9	123,27
7.1.2.3	0,53
7.1.2.10	122,52
10.2.3.11	75,35
10.2.3.8	162,62
10.2.3.4	46,44
9.2.3.11	38,86
9.2.3.8	83,17
9.2.3.4	160,65
1.2.3.11	161,59
1.2.3.8	39,56
1.2.3.4	76,62
11.3.4.12	29,53
11.3.4.5	147,84
11.3.4.13	90,49
8.3.4.12	90,23
8.3.4.5	28,09
8.3.4.13	149,76
2.3.4.12	151,31
2.3.4.5	90,37
2.3.4.13	31,29
4.3.8.19	162,85
4.3.8.20	72,07
4.3.8.6	43,77
11.3.8.19	77,95
11.3.8.20	47,13
11.3.8.6	162,97
2.3.8.19	43,57
2.3.8.20	168,64
2.3.8.6	75,52
13.4.5.14	120,02
13.4.5.6	121,67
12.4.5.15	120,02
12.4.5.6	118,32
3.4.5.15	121,67
3.4.5.14	118,32

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	3,876
Wb . .	10,557
Wd . .	7,738
Wdp. .	6,545
ΣW	28,715
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	20"
ΔW	$6\ 10^{-2}$ kcal

FIGURE : 216

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal bateau

paramètres de torsion B*

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br	1,7

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,300	0,768	0
3	1,166	2,195	- 0,552
4	0,768	2,166	- 2,039
5	- 0,768	2,166	- 2,039
6	- 1,166	2,195	- 0,552
7	- 1,300	0,768	0
8	0	2,916	0,148
9 Br	2,055	0,809	1,786
10	2,046	0,211	- 0,622
11	2,109	2,760	- 0,411
12	1,162	3,031	- 2,570
13	1,191	1,317	- 2,574
14	- 1,162	3,031	- 2,570
15	- 1,191	1,317	- 2,574
16	- 2,109	2,760	- 0,411
17 Br	- 2,055	0,809	1,786
18	- 2,046	0,211	- 0,622
19	0	2,774	1,227
20	0	3,976	- 0,100
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	118,82
1.2.3	113,44
2.3.4	110,60
13.4.5	112,88
2.3.8	109,70
3.8.6	98,53
1.2.9	110,23
1.2.10	108,68
11.3.4	110,70
20.8.3	110,63
19.8.20	110,59
12.4.5	111,24
3.4.5	105,00
4.3.8	104,61
8.3.11	110,36
12.4.13	103,79
9.2.10	105,23
19.8.3	112,97
21.1.2	120,59

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	78,92
21.1.2.3	156,92
21.1.2.10	35,92
7.1.2.9	101,08
7.1.2.3	23,08
7.1.2.10	144,08
10.2.3.11	66,37
10.2.3.8	171,60
10.2.3.4	56,71
9.2.3.11	48,47
9.2.3.8	73,56
9.2.3.4	171,56
1.2.3.11	172,63
1.2.3.8	50,59
1.2.3.4	64,29
11.3.4.12	26,75
11.3.4.5	147,17
11.3.4.13	89,46
8.3.4.12	92,13
8.3.4.5	28,30
8.3.4.13	151,67
2.3.4.12	149,83
2.3.4.5	89,75
2.3.4.13	33,62
4.3.8.19	164,05
4.3.8.20	71,36
4.3.8.6	44,57
11.3.8.19	76,84
11.3.8.20	47,75
11.3.8.6	163,67
2.3.8.19	45,39
2.3.8.20	169,98
2.3.8.6	74,09
13.4.5.14	116,21
13.4.5.6	123,37
12.4.5.15	116,21
12.4.5.6	120,43
3.4.5.15	123,37
3.4.5.14	120,43

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal chaise

paramètres de torsion B*

μ (D)	
C = O	3,1
C - Br	1,9

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	0,987
Wb . .	10,742
Wd . .	7,695
Wdp. .	7,977
ΣW	27,400
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	1"
ΔW	10^{-4} kcal

fonctions :

C---C $16600e^{-4,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ r≥2,4Å

$- 10,162r + 24,29$ r<2,4Å

FIGURE : 217

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,304	0,761	0
3	1,158	2,290	0,015
4	0,768	2,822	- 1,376
5	- 0,768	2,822	- 1,376
6	- 1,158	2,290	0,015
7	- 1,304	0,761	0
8	0	2,685	0,948
9 Br	2,362	0,209	1,530
10	1,920	0,451	- 0,880
11	2,103	2,760	0,352
12	1,148	3,832	- 1,517
13	1,187	2,225	- 2,185
14	- 1,148	3,832	- 1,517
15	- 1,187	2,225	- 2,185
16	- 2,103	2,760	0,352
17 Br	- 2,362	0,209	1,530
18	- 1,920	0,451	- 0,880
19	0	2,131	1,886
20	0	3,758	1,134
21	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
2.1.7	119,49
1.2.3	114,78
2.3.4	111,07
13.4.5	112,61
2.3.8	109,46
3.8.6	97,60
1.2.9	109,12
1.2.10	109,61
11.3.4	110,12
20.8.3	110,87
19.8.20	110,78
12.4.5	110,44
3.4.5	104,68
4.3.8	105,59
8.3.11	110,37
12.4.13	106,13
9.2.10	103,99
19.8.3	113,06
21.1.2	120,25

Dièdres (d°)	
21.1.2.9	56,59
21.1.2.3	179,41
21.1.2.10	56,70
7.1.2.9	123,41
7.1.2.3	0,59
7.1.2.10	123,30
10.2.3.11	75,04
10.2.3.8	163,45
10.2.3.4	47,25
9.2.3.11	38,25
9.2.3.8	83,27
9.2.3.4	160,53
1.2.3.11	161,05
1.2.3.8	39,54
1.2.3.4	76,67
11.3.4.12	28,57
11.3.4.5	147,45
11.3.4.13	89,88
8.3.4.12	90,59
8.3.4.5	28,29
8.3.4.13	150,96
2.3.4.12	150,85
2.3.4.5	90,27
2.3.4.13	32,40
4.3.8.19	163,20
4.3.8.20	71,71
4.3.8.6	44,11
11.3.8.19	77,79
11.3.8.20	47,30
11.3.8.6	163,12
2.3.8.19	43,57
2.3.8.20	168,66
2.3.8.6	75,52
13.4.5.14	118,46
13.4.5.6	122,66
12.4.5.15	118,46
12.4.5.6	118,88
3.4.5.15	122,66
3.4.5.14	118,88

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée

12 variables

cycle hexagonal bateau

paramètres de torsion B*

μ (D)	
C = O	2,6
C - Br	1,7

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	3,083
Wb . .	10,994
Wd . .	7,704
Wdp. .	6,545
ΣW	28,326
W_L . .	
$\Sigma W+W_L$.	

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	0,2 kcal

fonctions :

C---C $16600e^{-3,63r} - 325/r^6$

C---H $30000e^{-4,17r} - 140/r^6$

H---H $10000e^{-4,6r} - 49,2/r^6$ r≥2,4Å

$- 10,162r + 24,29$ r<2,4Å

FIGURE : 218

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,311	0,750	0
3	1,171	2,268	0,186
4	0,010	2,767	- 0,692
5	- 1,171	2,271	0,161
6	- 1,311	0,750	0
7 Br	2,519	- 0,004	1,318
8	1,822	0,562	- 0,978
9	0,751	2,630	1,622
10	2,116	2,776	- 0,091
11	0,0120	3,853	- 0,774
12	0,017	2,314	- 1,682
13	- 0,787	2,667	1,597
14	- 2,113	2,781	- 0,123
15	- 1,963	0,347	0,816
16 Br	- 2,230	0,382	- 1,668
17	1,132	1,916	2,350
18	1,139	3,612	1,890
19	- 1,209	1,980	2,329
20	- 1,142	3,674	1,816
21	- 0,007	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée - isomère trans

34 variables

cycle hexagonal chaise

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br_7	2,1
C - Br_{16}	2,0
μ_D	4,12D

Angles (d°)			
2.1.6	120,43	16.6.1	108,47
1.2.3	114,34	17.9.3	111,95
2.3.4	108,65	17.9.13	112,11
i	6,97	18.9.3	110,15
i'	6,00	18.9.13	109,77
1.6.5	114,41	19.13.5	111,84
7.2.1	110,32	19.13.9	111,16
7.2.3	110,98	20.13.5	110,32
8.2.1	108,25	20.13.9	110,16
8.2.3	108,27	21.1.6	119,46
9.3.2	111,74	21.1.2	120,11
9.3.4	104,49	9.3.10	111,01
10.3.2	110,17	13.5.14	109,41
10.3.4	110,64	3.9.13	105,29
11.4.3	111,41	9.13.5	104,94
11.4.5	111,38	3.4.5	99,10
12.4.3	112,28	4.5.6	109,33
12.4.5	111,97	13.5.4	104,06
13.5.6	112,03	7.2.8	104,11
14.5.4	111,27	11.4.12	110,30
14.5.6	110,58	15.6.16	106,39
15.6.5	109,46	17.9.18	107,57
15.6.1	109,07	19.13.20	108,81
16.6.5	108,72		

Energie (kcal/mole)	
Wa	3,226
Wb	10,795
Wd	8,972
Wdp. . . .	8,611
ΣW	31,603
W_L	- 3,517
$\Sigma W+W_L$ . . .	28,086

$\Delta\theta_{2.1.6}$	20"
ΔW	4 10^{-3} kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	7,65	13.5.6.16	165,36
6.1.2.7	133,57	14.5.6.1	164,43
6.1.2.8	113,11	14.5.6.15	72,83
21.1.2.3	172,35	14.5.6.16	43,01
21.1.2.7	46,43	2.3.9.13	90,96
21.1.2.8	66,89	2.3.9.17	31,11
1.2.3.4	43,57	2.3.9.18	150,75
1.2.3.9	71,20	4.3.9.13	26,34
1.2.3.10	164,92	4.3.9.17	148,41
7.2.3.4	169,13	4.3.9.18	91,95
7.2.3.9	54,37	10.3.9.13	145,62
7.2.3.10	69,52	10.3.9.17	92,31
8.2.3.4	77,18	10.3.9.18	27,34
8.2.3.9	168,05	6.5.13.9	88,19
8.2.3.10	44,16	6.5.13.19	32,33
2.3.4.11	167,03	6.5.13.20	153,29
2.3.4.12	42,74	4.5.13.9	29,81
9.3.4.5	43,78	4.5.13.19	150,33
9.3.4.11	73,57	4.5.13.20	88,71
9.3.4.12	162,15	14.5.13.9	148,81
10.3.4.5	163,32	14.5.13.19	90,67
10.3.4.11	45,97	14.5.13.20	30,28
10.3.4.12	78,32	5.13.9.3	2,11
3.4.5.6	74,73	5.13.9.17	119,85
3.4.5.13	45,12	5.13.9.18	120,66
3.4.5.14	162,84	19.13.9.3	122,94
11.4.5.6	167,90	19.13.9.17	0,96
11.4.5.13	72,26	19.13.9.18	118,52
11.4.5.14	45,46	20.13.9.3	116,37
12.4.5.6	43,86	20.13.9.17	121,66
12.4.5.13	163,71	20.13.9.18	2,16
12.4.5.14	78,57	5.6.1.2	6,59
4.5.6.1	41,58	15.6.1.2	129,55
4.5.6.15	164,33	16.6.1.2	114,96
4.5.6.16	79,83	5.6.1.21	173,41
13.5.6.1	73,23	15.6.1.21	50,45
13.5.6.15	49,52	16.6.1.21	65,04

FIGURE : 219

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,307	0,756	0
3	1,164	2,279	- 0,137
4	- 0,001	2,592	- 1,093
5	- 1,170	2,279	- 0,142
6	- 1,307	0,756	0
7 Br	2,357	0,283	1,562
8	1,929	0,384	- 0,854
9	0,760	2,939	1,193
10	2,109	2,720	- 0,511
11	0	3,642	- 1,383
12	0	1,957	- 1,977
13	- 0,779	2,916	1,203
14	- 2,116	2,722	- 0,510
15	- 1,873	0,514	0,936
16 Br	- 2,403	0,090	- 1,456
17	1,160	2,407	2,055
18	1,122	3,965	1,236
19	- 1,161	2,341	2,045
20	- 1,170	3,931	1,264
21	- 0,010	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octanone-3
αα' dibromée - isomère trans

34 variables

cycle hexagonal bateau

fonctions du tableau 8

μ (D)	
C = O	2,9
C - Br_7	2,0
C - Br_{16}	2,1
μ_D	4,11D

Angles (d°)			
2.1.6	119,93	16.6.1	108,50
1.2.3	114,56	17.9.3	112,23
2.3.4	109,15	17.9.13	110,80
i	5,13	18.9.3	110,51
i'	5,30	18.9.13	110,29
1.6.5	114,75	19.13.5	111,82
7.2.1	110,27	19.13.9	111,33
7.2.3	111,33	20.13.5	110,29
8.2.1	108,35	20.13.9	110,21
8.2.3	108,22	21.1.6	119,55
9.3.2	111,87	21.1.2	120,52
9.3.4	104,50	9.3.10	110,19
10.3.2	111,20	13.5.14	109,98
10.3.4	110,81	3.9.13	105,21
11.4.3	111,20	9.13.5	104,70
11.4.5	111,19	3.4.5	98,61
12.4.3	112,64	4.5.6	109,10
12.4.5	112,55	13.5.4	105,26
13.5.6	110,64	7.2.8	103,45
14.5.4	111,22	11.4.12	110,22
14.5.6	110,52	15.6.16	105,53
15.6.5	109,67	17.9.18	107,82
15.6.1	109,22	19.13.20	108,88
16.6.5	108,76		

Energie (kcal/mole)	
Wa	3,821
Wb	10,747
Wd	9,717
Wdp. . . .	8,628
ΣW	32,913
W_L	- 3,762
$\Sigma W+W_L$ . . .	29,151

$\Delta\theta_{2.1.6}$	2'
ΔW	10^{-2} kcal

Dièdres (d°)			
6.1.2.3	5,64	13.5.6.16	159,14
6.1.2.7	120,88	14.5.6.1	158,79
6.1.2.8	126,55	14.5.6.15	77,86
21.1.2.3	174,36	14.5.6.16	37,08
21.1.2.7	59,12	2.3.9.13	88,74
21.1.2.8	53,45	2.3.9.17	31,84
1.2.3.4	36,61	2.3.9.18	152,23
1.2.3.9	78,54	4.3.9.13	29,22
1.2.3.10	158,51	4.3.9.17	149,80
7.2.3.4	162,58	4.3.9.18	89,81
7.2.3.9	47,43	10.3.9.13	148,30
7.2.3.10	75,52	10.3.9.17	91,12
8.2.3.4	84,37	10.3.9.18	29,27
8.2.3.9	160,48	6.5.13.9	90,97
8.2.3.10	37,53	6.5.13.19	29,57
2.3.4.11	167,80	6.5.13.20	150,59
2.3.4.12	43,51	4.5.13.9	26,75
9.3.4.5	44,41	4.5.13.19	147,29
9.3.4.11	72,39	4.5.13.20	91,69
9.3.4.12	163,31	14.5.13.9	146,65
10.3.4.5	163,06	14.5.13.19	92,81
10.3.4.11	46,27	14.5.13.20	28,21
10.3.4.12	78,03	5.13.9.3	1,54
3.4.5.6	75,08	5.13.9.17	123,06
3.4.5.13	43,68	5.13.9.18	117,64
3.4.5.14	162,75	19.13.9.3	119,19
11.4.5.6	168,11	19.13.9.17	2,33
11.4.5.13	73,12	19.13.9.18	121,63
11.4.5.14	45,95	20.13.9.3	119,88
12.4.5.6	43,89	20.13.9.17	118,60
12.4.5.13	162,65	20.13.9.18	0,701
12.4.5.14	78,28	5.6.1.2	5,84
4.5.6.1	36,20	15.6.1.2	117,75
4.5.6.15	159,55	16.6.1.2	127,69
4.5.6.16	85,51	5.6.1.21	174,16
13.5.6.1	79,15	15.6.1.21	62,25
13.5.6.15	44,20	16.6.1.21	52,31

FIGURE : 220

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,282	0,798	0
3	1,172	2,065	- 0,861
4	0,665	1,670	- 2,218
5	- 0,665	1,670	- 2,218
6	- 1,172	2,065	- 0,861
7	- 1,282	0,798	0
8	0	2,903	- 0,322
9	1,535	1,088	1,052
10	2,110	0,157	- 0,398
11	2,113	2,649	- 0,900
12	1,295	1,422	- 3,070
13	- 1,295	1,422	- 3,070
14	- 2,113	2,649	- 0,900
15	- 1,535	1,088	1,052
16	- 2,110	0,157	- 0,398
17	0	2,987	0,764
18	0	3,900	- 0,761
19	0	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octène-6, one-3

cycle hexagonal chaise

11 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
7.1.2	116,23
1.2.3	112,03
2.3.4	108,30
12.4.5	125,34
2.3.8	107,90
3.8.6	99,26
1.2.9	109,20
1.2.10	108,99
2.3.11	113,20
17.8.3	113,03
18.8.3	110,95
3.4.5	109,74
19.1.2	121,89
9.2.10	108,37
8.3.11	111,81
17.8.18	109,36
3.4.12	124,92
8.3.4	101,69

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	0,482
Wb . . .	20,364
Wd . . .	3,451
ΣW . . .	24,298

$\Delta\theta_{2.1.7}$	1"
ΔW	0,1 kcal

Dièdres (d°)	
19.1.2.9	96,13
19.1.2.3	142,77
19.1.2.10	22,08
7.1.2.9	83,87
7.1.2.3	37,23
7.1.2.10	157,92
10.2.3.11	57,56
10.2.3.8	178,17
10.2.3.4	68,83
9.2.3.11	60,65
9.2.3.8	63,63
9.2.3.4	172,96
1.2.3.11	178,26
1.2.3.8	57,47
1.2.3.4	51,86
11.3.4.12	34,17
8.3.4.12	154,26
2.3.4.12	92,22
11.3.4.5	145,83
8.3.4.5	25,74
2.3.4.5	87,78
4.3.8.17	159,11
4.3.8.18	77,63
4.3.8.6	39,12
11.3.8.17	79,81
11.3.8.18	43,44
11.3.8.6	160,20
2.3.8.17	45,30
2.3.8.18	168,55
2.3.8.6	74,69

FIGURE : 221

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,318	0,737	0
3	1,171	2,266	0,006
4	0,665	2,695	- 1,341
5	- 0,665	2,695	- 1,341
6	- 1,171	2,266	0,006
7	- 1,318	0,737	0
8	0	2,633	0,934
9	1,925	0,416	0,897
10	1,970	0,397	- 0,859
11	2,106	2,784	0,297
12	1,289	2,965	- 2,190
13	- 1,289	2,965	- 2,190
14	- 2,106	2,784	0,297
15	- 1,925	0,416	0,897
16	- 1,970	0,397	- 0,859
17	0	2,090	1,878
18	0	3,705	1,127
19	0	- 1,225	0

bicyclo (3.2.1) octène-6, one-3

cycle hexagonal bateau

11 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
7.1.2	121,60
1.2.3	113,71
2.3.4	108,27
12.4.5	124,97
2.3.8	108,24
3.8.6	99,12
1.2.9	109,47
1.2.10	111,11
2.3.11	112,71
17.8.3	113,79
18.8.3	110,03
3.4.5	109,69
19.1.2	119,20
9.2.10	102,08
8.3.11	111,84
17.8.18	109,68
3.4.12	125,34
8.3.4	102,48

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	- 0,105
Wb . . .	22,146
Wd . . .	5,267
ΣW . . .	27,308

$\Delta\theta_{2.1.7}$	1"
ΔW	$5\ 10^{-3}$ kcal

Dièdres (d°)	
19.1.2.9	57,33
19.1.2.3	179,81
19.1.2.10	54,45
7.1.2.9	122,67
7.1.2.3	0,18
7.1.2.10	125,55
10.2.3.11	70,75
10.2.3.8	165,01
10.2.3.4	54,62
9.2.3.11	41,03
9.2.3.8	83,21
9.2.3.4	166,40
1.2.3.11	163,47
1.2.3.8	39,23
1.2.3.4	71,16
11.3.4.12	34,73
8.3.4.12	155,11
2.3.4.12	90,64
11.3.4.5	145,27
8.3.4.5	24,89
2.3.4.5	89,36
4.3.8.17	158,80
4.3.8.18	77,67
4.3.8.6	37,65
11.3.8.17	80,22
11.3.8.18	43,31
11.3.8.6	158,63
2.3.8.17	44,53
2.3.8.18	168,06
2.3.8.6	76,62

FIGURE : 222

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,278	0,789	0
3	1,184	2,034	- 0,894
4	0,665	1,632	- 2,244
5	- 0,665	1,632	- 2,244
6	- 1,184	2,034	- 0,894
7	- 1,287	0,789	0
8	0	2,865	- 0,368
9	1,476	1,136	1,048
10 Me	2,783	- 0,308	- 0,495
11	2,114	2,634	- 0,933
12	1,299	1,380	- 3,092
13	- 1,299	1,380	- 3,092
14	- 2,114	2,634	- 0,933
15	- 1,476	1,136	1,048
16	- 2,783	- 0,308	- 0,495
17	0	2,979	0,715
18	0	3,857	- 0,818
19	0	- 1,225	0

cis diméthyl-2,4

bicyclo (3.2.1) octène-6, one-3

cycle hexagonal chaise

11 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
7.1.2	116,98
1.2.3	111,47
2.3.4	109,25
12.4.5	125,61
2.3.8	106,89
3.8.6	100,56
1.2.9	107,77
1.2.10	111,45
2.3.11	113,76
17.8.3	113,35
18.8.3	110,51
3.4.5	110,20
19.1.2	121,51
9.2.10	106,68
8.3.11	111,46
17.8.18	108,43
3.4.12	124,19
8.3.4	100,75

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	3,975
Wb . . .	20,917
Wd . . .	3,374
ΣW . . .	28,265

$\Delta\theta_{2.1.7}$	20"
ΔW	$2\ 10^{-3}$ kcal

Dièdres (d°)	
19.1.2.9	100,64
19.1.2.3	141,30
19.1.2.10	16,08
7.1.2.9	79,36
7.1.2.3	38,70
7.1.2.10	163,92
10.2.3.11	53,93
10.2.3.8	177,39
10.2.3.4	74,39
9.2.3.11	62,79
9.2.3.8	60,68
9.2.3.4	168,89
1.2.3.11	179,16
1.2.3.8	57,39
1.2.3.4	50,82
11.3.4.12	35,32
8.3.4.12	154,70
2.3.4.12	93,00
11.3.4.5	144,68
8.3.4.5	25,30
2.3.4.5	87,00
4.3.8.17	160,18
4.3.8.18	77,87
4.3.8.6	38,88
11.3.8.17	78,80
11.3.8.18	43,15
11.3.8.6	159,90
2.3.8.17	46,08
2.3.8.18	168,03
2.3.8.6	75,22

FIGURE : 223

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,316	0,740	0
3	1,184	2,270	0,019
4	0,665	2,794	- 1,288
5	- 0,665	2,794	- 1,288
6	- 1,184	2,270	0,019
7	- 1,316	0,740	0
8	0	2,604	0,943
9	1,826	0,462	0,959
10 Me	2,573	0,086	- 1,296
11	2,122	2,770	0,331
12	1,286	3,127	- 2,118
13	- 1,286	3,127	- 2,118
14	- 2,122	2,770	0,331
15	- 1,826	0,462	0,959
16	- 2,573	0,086	- 1,296
17	0	2,058	1,885
18	0	3,668	1,177
19	0	- 1,225	0

cis diméthyl-2,4

bicyclo (3.2.1) octène-6, one-3

cycle hexagonal bateau

11 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
7.1.2	121,32
1.2.3	114,41
2.3.4	111,52
12.4.5	124,75
2.3.8	106,85
3.8.6	100,63
1.2.9	105,99
1.2.10	113,82
2.3.11	112,36
17.8.3	114,25
18.8.3	109,93
3.4.5	110,22
19.1.2	119,34
9.2.10	101,24
8.3.11	112,59
17.8.18	107,71
3.4.12	125,03
8.3.4	100,44

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	3,167
Wb . . .	25,299
Wd . . .	4,927
ΣW . . .	33,393

$\Delta\theta_{2.1.7}$	1"
ΔW	$5\ 10^{-3}$ kcal

Dièdres (d°)	
19.1.2.9	62,84
19.1.2.3	179,24
19.1.2.10	47,53
7.1.2.9	117,16
7.1.2.3	0,77
7.1.2.10	132,47
10.2.3.11	64,52
10.2.3.8	171,52
10.2.3.4	62,68
9.2.3.11	45,85
9.2.3.8	78,11
9.2.3.4	173,05
1.2.3.11	162,23
1.2.3.8	38,27
1.2.3.4	70,57
11.3.4.12	34,51
8.3.4.12	154,40
2.3.4.12	92,68
11.3.4.5	145,49
8.3.4.5	25,60
2.3.4.5	87,32
4.3.8.17	162,30
4.3.8.18	76,49
4.3.8.6	39,42
11.3.8.17	77,97
11.3.8.18	43,24
11.3.8.6	159,15
2.3.8.17	45,84
2.3.8.18	167,06
2.3.8.6	77,04

FIGURE : 224

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,305	0,759	0
3	1,182	2,106	- 0,728
4	0,665	1,828	- 2,109
5	- 0,665	1,828	- 2,109
6	- 1,182	2,106	- 0,728
7	- 1,305	0,759	0
8	0	2,903	- 0,148
9 Me	2,057	0,936	1,758
10	2,036	0,143	- 0,584
11	2,127	2,685	- 0,728
12	1,302	1,654	- 2,974
13	- 1,302	1,654	- 2,974
14	- 2,127	2,685	- 0,728
15	- 2,057	0,936	1,758
16	- 2,036	0,143	- 0,584
17	0	2,972	0,939
18	0	3,915	- 0,549
19	0	- 1,225	0

cis diméthyl-2,4

bicyclo (3.2.1) octène-6, one-3

cycle hexagonal chaise

11 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
7.1.2	119,63
1.2.3	111,81
2.3.4	107,53
12.4.5	125,81
2.3.8	109,71
3.8.6	100,33
1.2.9	112,62
1.2.10	106,73
2.3.11	112,93
17.8.3	114,14
18.8.3	110,02
3.4.5	110,12
19.1.2	120,19
9.2.10	105,79
8.3.11	112,63
17.8.18	108,01
3.4.12	124,07
8.3.4	100,31

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	4,954
Wb . . .	22,107
Wd . . .	3,743
ΣW . . .	30,804

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

Dièdres (d°)	
19.1.2.9	82,70
19.1.2.3	149,31
19.1.2.10	32,96
7.1.2.9	97,30
7.1.2.3	30,69
7.1.2.10	147,04
10.2.3.11	64,33
10.2.3.8	169,14
10.2.3.4	60,93
9.2.3.11	51,33
9.2.3.8	75,20
9.2.3.4	176,59
1.2.3.11	179,33
1.2.3.8	52,78
1.2.3.4	55,42
11.3.4.12	33,77
8.3.4.12	153,88
2.3.4.12	91,49
11.3.4.5	146,23
8.3.4.5	26,12
2.3.4.5	88,51
4.3.8.17	162,70
4.3.8.18	75,70
4.3.8.6	40,20
11.3.8.17	76,98
11.3.8.18	44,62
11.3.8.6	160,52
2.3.8.17	49,73
2.3.8.18	171,33
2.3.8.6	72,77

FIGURE : 225

—

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,310	0,751	0
3	1,178	2,166	0,582
4	0,655	3,055	- 0,514
5	- 0,655	3,055	- 0,514
6	- 1,178	2,166	0,582
7	- 1,310	0,751	0
8	0	2,176	1,572
9 Me	2,688	- 0,246	0,891
10	1,641	0,853	- 1,065
11	2,117	2,537	1,037
12	1,304	3,610	- 1,198
13	- 1,304	3,610	- 1,198
14	- 2,117	2,537	1,037
15	- 2,688	- 0,246	0,891
16	- 1,641	0,853	- 1,065
17	0	1,323	2,249
18	0	3,094	2,158
19	0	- 1,225	0

cis diméthyl-2,4

bicyclo (3.2.1) octène-6, one-3

cycle hexagonal bateau

11 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
7.1.2	120,37
1.2.3	112,56
2.3.4	107,39
12.4.5	125,94
2.3.8	108,38
3.8.6	99,90
1.2.9	111,37
1.2.10	107,56
2.3.11	113,04
17.8.3	113,29
18.8.3	110,58
3.4.5	109,97
19.1.2	119,82
9.2.10	106,05
8.3.11	112,48
17.8.18	108,98
3.4.12	124,09
8.3.4	101,79

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	4,482
Wb . . .	21,356
Wd . . .	6,608
ΣW . . .	32,446

$\Delta\theta_{2.1.7}$	7'
ΔW	10^{-2} kcal

Dièdres (d°)	
19.1.2.9	29,89
19.1.2.3	155,79
19.1.2.10	85,90
7.1.2.9	150,11
7.1.2.3	24,21
7.1.2.10	94,10
10.2.3.11	89,47
10.2.3.8	145,15
10.2.3.4	35,90
9.2.3.11	26,33
9.2.3.8	99,05
9.2.3.4	151,70
1.2.3.11	152,23
1.2.3.8	26,84
1.2.3.4	82,41
11.3.4.12	34,34
8.3.4.12	155,21
2.3.4.12	91,03
11.3.4.5	145,66
8.3.4.5	24,79
2.3.4.5	88,97
4.3.8.17	158,56
4.3.8.18	78,77
4.3.8.6	37,76
11.3.8.17	80,17
11.3.8.18	42,50
11.3.8.6	159,03
2.3.8.17	45,54
2.3.8.18	168,21
2.3.8.6	75,26

FIGURE : 226

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,307	0,756	0
3	1,185	2,063	- 0,798
4	0,665	1,738	- 2,168
5	- 0,665	1,738	- 2,168
6	- 1,185	2,063	- 0,798
7	- 1,307	0,756	0
8	0	2,892	- 0,272
9 Me	1,918	1,088	1,790
10 Me	2,676	- 0,341	- 0,781
11	2,120	2,657	- 0,813
12	1,297	1,533	- 3,030
13	- 1,297	1,533	- 3,030
14	- 2,120	2,657	- 0,813
15	- 1,918	1,088	1,790
16	- 2,676	- 0,341	- 0,781
17	0	3,048	0,806
18	0	3,875	- 0,740
19	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
7.1.2	119,92
1.2.3	110,94
2.3.4	108,49
12.4.5	125,47
2.3.8	109,98
3.8.6	100,76
1.2.9	111,23
1.2.10	109,34
2.3.11	113,35
17.8.3	114,54
18.8.3	109,83
3.4.5	110,27
19.1.2	120,04
9.2.10	104,56
8.3.11	111,45
17.8.18	107,24
3.4.12	124,26
8.3.4	99,31

Dièdres (d°)	
19.1.2.9	89,42
19.1.2.3	146,21
19.1.2.10	25,55
7.1.2.9	90,58
7.1.2.3	33,79
7.1.2.10	154,45
10.2.3.11	60,09
10.2.3.8	174,39
10.2.3.4	66,75
9.2.3.11	54,87
9.2.3.8	70,64
9.2.3.4	178,29
1.2.3.11	179,25
1.2.3.8	53,72
1.2.3.4	53,92
11.3.4.12	34,87
8.3.4.12	153,20
2.3.4.12	91,97
11.3.4.5	145,13
8.3.4.5	26,80
2.3.4.5	88,03
4.3.8.17	165,01
4.3.8.18	74,27
4.3.8.6	41,55
11.3.8.17	75,25
11.3.8.18	45,47
11.3.8.6	161,29
2.3.8.17	51,34
2.3.8.18	172,06
2.3.8.6	72,12

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	10,992
Wb . . .	23,682
Wd . . .	3,298
ΣW . . .	37,972

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

tétraméthyl-2,2,4,4
bicyclo (3.2.1) octène-6, one-3
cycle hexagonal chaise
11 variables
fonctions du tableau 8

FIGURE : 227

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,312	0,747	0
3	1,190	2,278	0,010
4	0,665	2,758	- 1,313
5	- 0,665	2,758	- 1,313
6	- 1,190	2,278	0,010
7	- 1,312	0,747	0
8	0	2,650	0,912
9 Me	2,307	0,214	1,554
10 Me	2,417	0,169	- 1,460
11	2,107	2,800	0,346
12	1,291	3,062	- 2,149
13	- 1,291	3,062	- 2,149
14	- 2,107	2,800	0,346
15	- 2,307	0,214	1,554
16	- 2,417	0,169	- 1,460
17	0	2,150	1,880
18	0	3,723	1,095
19	0	- 1,225	0

Angles (d°)	
7.1.2	120,69
1.2.3	115,08
2.3.4	109,95
12.4.5	125,07
2.3.8	107,82
3.8.6	101,25
1.2.9	108,24
1.2.10	110,54
2.3.11	113,91
17.8.3	114,23
18.8.3	109,66
3.4.5	110,44
19.1.2	119,65
9.2.10	103,51
8.3.11	110,39
17.8.18	107,66
3.4.12	124,49
8.3.4	99,76

Dièdres (d°)	
19.1.2.9	58,41
19.1.2.3	179,64
19.1.2.10	54,30
7.1.2.9	121,59
7.1.2.3	0,37
7.1.2.10	125,70
10.2.3.11	73,30
10.2.3.8	163,82
10.2.3.4	55,99
9.2.3.11	39,42
9.2.3.8	83,47
9.2.3.4	168,70
1.2.3.11	160,61
1.2.3.8	37,73
1.2.3.4	70,10
11.3.4.12	36,71
8.3.4.12	154,31
2.3.4.12	92,56
11.3.4.5	143,29
8.3.4.5	25,69
2.3.4.5	87,44
4.3.8.17	163,07
4.3.8.18	75,99
4.3.8.6	39,81
11.3.8.17	76,71
11.3.8.18	44,22
11.3.8.6	160,03
2.3.8.17	48,30
2.3.8.18	169,24
2.3.8.6	74,96

Energie (kcal/mole)	
Wa . . .	10,899
Wb . . .	25,320
Wd . . .	5,123
ΣW . . .	41,343

$\Delta\theta_{2.1.7}$	1"
ΔW	10^{-2} kcal

tétraméthyl-2,2,4,4
bicyclo (3.2.1) octène-6, one-3
cycle hexagonal bateau
11 variables
fonctions du tableau 8

FIGURE : 228

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,281	0,841	0
3	1,173	2,128	- 0,831
4	0,768	1,837	- 2,287
5	- 0,768	1,837	- 2,287
6	- 1,173	2,128	- 0,831
7	- 1,281	0,841	0
8	0	2,962	- 0,285
9	1,516	1,124	1,058
10	2,148	0,225	- 0,350
11	2,123	2,697	- 0,795
12	1,135	2,631	- 2,935
13	1,182	0,899	- 2,653
14	- 1,135	2,631	- 2,935
15	- 1,182	0,899	- 2,653
16	- 2,123	2,697	- 0,795
17	- 1,516	1,124	1,058
18	- 2,148	0,225	- 0,350
19	0	3,033	0,802
20	0	3,965	- 0,710
21	0	- 0,598	0,947
22	0	- 1,042	- 0,959
23	0,640	- 0,671	- 1,558

Angles (d°)	
2.1.7	113,43
1.2.3	113,65
2.3.4	111,82
1.22.23	98,04
2.3.8	108,42
3.8.6	99,28
1.2.9	108,30
1.2.10	110,25
2.3.11	110,65
2.8.20	111,12
19.8.3	112,88
12.4.3	109,70
13.4.3	112,37
21.1.2	107,03
22.1.2	113,81
4.3.8	103,74
8.3.11	111,36
12.4.13	107,44
9.2.10	105,75
19.8.20	109,30
21.1.22	100,39
3.4.5	105,25

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	143,57	8.3.4.13	150,99
22.1.2.3	96,04	2.3.4.12	153,80
22.1.2.10	28,31	2.3.4.5	88,25
21.1.2.9	33,61	2.3.4.13	34,36
21.1.2.3	154,00	4.3.8.19	164,88
21.1.2.10	81,65	4.3.8.20	71,92
7.1.2.9	84,20	4.3.8.6	45,11
7.1.2.3	36,19	11.3.8.19	76,08
7.1.2.10	160,54	11.3.8.20	47,12
10.2.3.11	55,71	11.3.8.6	164,15
10.2.3.8	178,11	2.3.8.19	45,89
10.2.3.4	68,12	2.3.8.20	169,08
9.2.3.11	59,55	2.3.8.6	73,89
9.2.3.8	62,85	13.4.5.14	119,45
9.2.3.4	176,62	13.4.5.6	122,60
1.2.3.11	180,00	12.4.5.15	119,45
1.2.3.8	57,54	12.4.5.6	117,95
1.2.3.4	56,23	3.4.5.15	122,60
11.3.4.12	29,97	3.4.5.14	117,95
11.3.4.5	147,92	23.22.1.2	23,25
11.3.4.13	89,48	23.22.1.6	72,52
8.3.4.12	89,56	23.22.1.21	137,22
8.3.4.5	28,39		

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	4,170
Wb . .	11,073
Wd . .	10,038
ΣW . .	25,282

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	1,989
O_{22}---C_7	2,470
O_{22}---H_{13}	2,834
H_{23}---C_7	2,899

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2'
ΔW	$3\ 10^{-3}$ kcal

bicyclo(3.2.1) octanol-3
cycle hexagonal chaise
isomère endo
16 variables
fonctions du tableau 8

FIGURE : 229

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,277	0,846	0
3	1,169	2,077	0,912
4	0,768	3,320	0,097
5	- 0,768	3,320	0,097
6	- 1,169	2,077	0,912
7	- 1,277	0,846	0
8	0	1,887	1,895
9	2,133	0,212	0,347
10	1,523	1,165	- 1,045
11	2,125	2,253	1,444
12	1,139	4,219	0,585
13	1,181	3,303	- 0,911
14	- 1,139	4,219	0,585
15	- 1,181	3,303	- 0,911
16	- 2,125	2,253	1,444
17	- 2,133	0,212	0,347
18	1,523	1,165	- 1,045
19	0	0,922	2,399
20	0	2,676	2,646
21	0	- 0,606	0,942
22	0	- 0,992	- 1,010
23	0,429	- 0,487	- 1,693

Angles (d°)	
2.1.7	112,97
1.2.3	112,56
2.3.4	110,57
1.22.23	98,06
2.3.8	109,51
3.8.6	98,80
1.2.9	108,91
1.2.10	109,91
2.3.11	110,54
2.8.20	110,56
19.8.3	113,92
12.4.3	109,92
13.4.3	112,27
21.1.2	107,37
22.1.2	112,76
4.3.8	103,92
8.3.11	111,59
12.4.13	107,38
9.2.10	106,45
19.8.20	108,80
21.1.22	102,78
3.4.5	105,09

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	69,82	8.3.4.13	151,04
22.1.2.3	169,31	2.3.4.12	153,08
22.1.2.10	46,44	2.3.4.5	88,69
21.1.2.9	42,68	2.3.4.13	33,63
21.1.2.3	78,19	4.3.8.19	166,64
21.1.2.10	158,94	4.3.8.20	70,47
7.1.2.9	160,87	4.3.8.6	45,48
7.1.2.3	39,99	11.3.8.19	74,22
7.1.2.10	82,87	11.3.8.20	48,66
10.2.3.11	96,11	11.3.8.6	164,61
10.2.3.8	140,55	2.3.8.19	48,50
10.2.3.4	26,63	2.3.8.20	171,38
9.2.3.11	20,15	2.3.8.6	72,67
9.2.3.8	103,20	13.4.5.14	119,46
9.2.3.4	142,88	13.4.5.6	122,32
1.2.3.11	141,02	12.4.5.15	119,46
1.2.3.8	17,68	12.4.5.6	118,22
1.2.3.4	96,24	3.4.5.15	122,32
11.3.4.12	30,35	3.4.5.14	118,22
11.3.4.5	148,57	23.22.1.2	37,63
11.3.4.13	89,11	23.22.1.6	81,28
8.3.4.12	89,50	23.22.1.21	152,91
8.3.4.5	28,72		

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	4,580
Wb . .	10,465
Wd . .	12,004
ΣW . .	27,049

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	3,942
O_{22}---C_7	2,456
O_{22}---H_{13}	4,456
H_{23}---C_7	2,749

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2'
ΔW	10^{-2} kcal

bicyclo (3.2.1) octanol-3
cycle hexagonal bateau
isomère endo
16 variables
fonctions du tableau 8

FIGURE : 230

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,262	0,869	0
3	1,172	2,067	- 0,956
4	0,768	1,623	- 2,373
5	- 0,768	1,623	- 2,373
6	- 1,172	2,067	- 0,956
7	- 1,262	0,869	0
8	0	2,958	- 0,507
9	1,443	1,246	1,039
10	2,155	0,243	- 0,256
11	2,124	2,634	- 0,973
12	1,137	2,341	- 3,104
13	1,179	0,648	- 2,631
14	- 1,137	2,341	- 3,104
15	- 1,179	0,648	- 2,631
16	- 2,124	2,634	- 0,973
17	- 1,443	1,246	1,039
18	- 2,155	0,243	- 0,256
19	0	3,156	0,563
20	0	3,906	- 1,044
21	0	- 0,624	0,930
22	0	- 0,920	- 1,076
23	0,666	- 1,508	- 0,733

bicyclo (3.2.1) octanol-3

cycle hexagonal chaise

isomère endo

16 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.7	110,92
1.2.3	113,23
2.3.4	111,29
1.22.23	97,30
2.3.8	108,35
3.8.6	99,22
1.2.9	108,90
1.2.10	109,88
2.3.11	111,02
2.8.20	111,10
19.8.3	113,07
12.4.3	109,81
13.4.3	112,16
21.1.2	108,42
22.1.2	111,61
4.3.8	103,61
8.3.11	111,28
12.4.13	107,66
9.2.10	105,77
19.8.20	109,04
21.1.22	105,61
3.4.5	105,23

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	3,690
Wb . .	10,201
Wd . .	7,864
ΣW . .	21,755

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2'
ΔW	10^{-2}kcal

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	156,18	8.3.4.13	150,80
22.1.2.3	82,51	2.3.4.12	154,22
22.1.2.10	40,76	2.3.4.5	87,65
21.1.2.9	40,27	2.3.4.13	34,56
21.1.2.3	161,57	4.3.8.19	165,48
21.1.2.10	75,15	4.3.8.20	71,53
7.1.2.9	78,67	4.3.8.6	45,44
7.1.2.3	42,63	11.3.8.19	75,15
7.1.2.10	165,91	11.3.8.20	47,84
10.2.3.11	53,28	11.3.8.6	164,82
10.2.3.8	175,77	2.3.8.19	47,19
10.2.3.4	70,94	2.3.8.20	170,18
9.2.3.11	62,14	2.3.8.6	72,85
9.2.3.8	60,35	13.4.5.14	119,66
9.2.3.4	173,64	13.4.5.6	122,21
1.2.3.11	176,56	12.4.5.15	119,66
1.2.3.8	60,95	12.4.5.6	118,13
1.2.3.4	52,34	3.4.5.15	122,21
11.3.4.12	30,00	3.4.5.14	118,13
11.3.4.5	148,14	23.22.1.2	72,79
11.3.4.13	89,66	23.22.1.6	163,29
8.3.4.12	89,54	23.22.1.21	44,83
8.3.4.5	28,59		

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	2,917
O_{22}---C_7	2,439
O_{22}---H_{13}	2,503
H_{23}---C_7	3,146

FIGURE : 231

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,283	0,838	0
3	1,173	2,093	0,879
4	0,768	3,313	0,033
5	- 0,768	3,313	0,033
6	- 1,173	2,093	0,879
7	- 1,283	0,838	0
8	0	1,931	1,861
9	2,130	0,206	0,371
10	1,549	1,128	- 1,048
11	2,130	2,284	1,405
12	1,138	4,226	0,498
13	1,178	3,267	- 0,975
14	- 1,138	4,226	0,498
15	- 1,178	3,267	- 0,975
16	- 2,130	2,284	1,405
17	- 2,130	0,206	0,371
18	- 1,549	1,128	- 1,048
19	0	0,978	2,388
20	0	2,733	2,598
21	0	- 0,620	0,933
22	0	- 0,914	- 1,081
23	0,678	- 1,496	- 0,755

bicyclo (3.2.1) octanol-3

cycle hexagonal bateau

16 variables

isomère endo

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.7	113,70
1.2.3	112,79
2.3.4	110,62
1.22.23	97,62
2.3.8	109,48
3.8.6	99,37
1.2.9	108,96
1.2.10	109,93
2.3.11	110,58
2.8.20	110,76
19.8.3	113,62
12.4.3	109,88
13.4.3	112,10
21.1.2	107,63
22.1.2	110,67
4.3.8	103,49
8.3.11	111,89
12.4.13	107,60
9.2.10	106,02
19.8.20	108,51
21.1.22	106,17
3.4.5	105,28

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	4,204
Wb . .	10,071
Wd . .	11,586
ΣW . .	25,860

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	10^{-3}kcal

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	75,23	8.3.4.13	150,69
22.1.2.3	163,63	2.3.4.12	153,11
22.1.2.10	40,55	2.3.4.5	88,62
21.1.2.9	40,38	2.3.4.13	33,51
21.1.2.3	80,76	4.3.8.19	166,49
21.1.2.10	156,16	4.3.8.20	71,07
7.1.2.9	159,49	4.3.8.6	45,46
7.1.2.3	38,35	11.3.8.19	74,44
7.1.2.10	84,73	11.3.8.20	48,00
10.2.3.11	94,87	11.3.8.6	164,53
10.2.3.8	141,41	2.3.8.19	48,51
10.2.3.4	27,99	2.3.8.20	170,95
9.2.3.11	20,92	2.3.8.6	72,52
9.2.3.8	102,80	13.4.5.14	119,60
9.2.3.4	143,77	13.4.5.6	122,13
1.2.3.11	142,06	12.4.5.15	119,60
1.2.3.8	18,33	12.4.5.6	118,27
1.2.3.4	95,09	3.4.5.15	122,13
11.3.4.12	30,25	3.4.5.14	118,27
11.3.4.5	148,53	23.22.1.2	70,55
11.3.4.13	89,35	23.22.1.6	177,27
8.3.4.12	89,72	23.22.1.21	45,96
8.3.4.5	28,56		

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	4,795
O_{22}---C_7	2,426
O_{22}---H_{13}	4,345
H_{23}---C_7	3,141

FIGURE : 232

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,273	0,853	0
3	1,176	2,030	- 0,982
4	0,768	1,545	- 2,384
5	- 0,768	1,545	- 2,384
6	- 1,176	2,030	- 0,982
7	- 1,273	0,853	0
8	0	2,927	- 0,554
9	1,453	1,247	1,033
10	2,156	0,215	- 0,260
11	2,127	2,597	- 1,018
12	1,137	2,240	- 3,137
13	1,177	0,562	- 2,613
14	- 1,137	2,240	- 3,137
15	- 1,177	0,562	- 2,613
16	- 2,127	2,597	- 1,028
17	- 1,453	1,247	1,033
18	- 2,156	0,215	- 0,260
19	0	3,152	0,511
20	0	3,861	- 1,114
21	0	- 0,605	- 0,942
22	0	- 0,992	1,010
23	0,633	- 0,583	1,592

Angles (d°)	
2.1.7	112,33
1.2.3	111,98
2.3.4	110,95
1.22.23	97,75
2.3.8	108,48
3.8.6	99,61
1.2.9	109,26
1.2.10	109,75
2.3.11	111,03
2.8.20	110,91
19.8.3	113,12
12.4.3	109,83
13.4.3	112,09
21.1.2	107,52
22.1.2	112,96
4.3.8	103,57
8.3.11	111,52
12.4.13	107,65
9.2.10	106,71
19.8.20	108,96
21.1.22	102,80
3.4.5	105,36

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	51,59	8.3.4.13	150,37
22.1.2.3	172,77	2.3.4.12	153,78
22.1.2.10	65,09	2.3.4.5	87,99
21.1.2.9	164,30	2.3.4.13	34,16
21.1.2.3	74,52	4.3.8.19	165,29
21.1.2.10	47,63	4.3.8.20	71,93
7.1.2.9	77,61	4.3.8.6	44,95
7.1.2.3	43,58	11.3.8.19	75,24
7.1.2.10	165,72	11.3.8.20	47,54
10.2.3.11	54,15	11.3.8.6	164,42
10.2.3.8	177,04	2.3.8.19	47,35
10.2.3.4	69,83	2.3.8.20	170,12
9.2.3.11	62,52	2.3.8.6	73,00
9.2.3.8	60,36	13.4.5.14	119,62
9.2.3.4	173,50	13.4.5.6	122,16
1.2.3.11	176,30	12.4.5.15	119,62
1.2.3.8	60,82	12.4.5.6	118,23
1.2.3.4	52,32	3.4.5.15	122,16
11.3.4.12	29,81	3.4.5.14	118,23
11.3.4.5	148,03	23.22.1.2	22,26
11.3.4.13	89,81	23.22.1.6	99,25
8.3.4.12	90,01	23.22.1.21	137,83
8.3.4.5	28,22		

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	3,505
Wb . .	10,159
Wd . .	8,833
ΣW . .	22,497

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	4,391
O_{22}---C_7	2,459
O_{22}---H_{13}	4,114
H_{23}---C_7	2,868

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2'
ΔW	$4\ 10^{-4}$ kcal

bicyclo (3.2.1) octanol-3

cycle hexagonal chaise

isomère exo

16 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 233

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,287	0,832	0
3	1,171	2,152	0,776
4	0,768	3,299	- 0,167
5	- 0,768	3,299	- 0,167
6	- 1,171	2,152	0,776
7	- 1,287	0,832	0
8	0	2,080	1,772
9	2,124	0,222	0,426
10	1,587	1,049	- 1,057
11	2,128	2,387	1,282
12	1,137	4,246	0,225
13	1,179	3,173	- 1,168
14	- 1,137	4,246	0,225
15	- 1,179	3,173	- 1,168
16	- 2,128	2,387	1,282
17	- 2,124	0,222	0,426
18	- 1,587	1,049	- 1,057
19	0	1,181	2,387
20	0	2,947	2,431
21	0	- 0,623	- 0,930
22	0	- 1,000	1,003
23	0,635	- 0,608	1,594

Angles (d°)	
2.1.7	114,24
1.2.3	113,79
2.3.4	110,53
1.22.23	98,55
2.3.8	110,13
3.8.6	99,07
1.2.9	109,40
1.2.10	109,30
2.3.11	110,37
2.8.20	110,73
19.8.3	113,84
12.4.3	109,79
13.4.3	112,19
21.1.2	107,59
22.1.2	112,54
4.3.8	103,45
8.3.11	111,81
12.4.13	107,70
9.2.10	105,28
19.8.20	108,42
21.1.22	101,26
3.4.5	105,18

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	26,27	8.3.4.13	151,13
22.1.2.3	96,42	2.3.4.12	152,98
22.1.2.10	141,08	2.3.4.5	88,96
21.1.2.9	84,42	2.3.4.13	33,27
21.1.2.3	152,89	4.3.8.19	167,16
21.1.2.10	30,39	4.3.8.20	70,38
7.1.2.9	156,22	4.3.8.6	45,96
7.1.2.3	33,52	11.3.8.19	74,08
7.1.2.10	88,98	11.3.8.20	48,38
10.2.3.11	92,78	11.3.8.6	164,73
10.2.3.8	143,29	2.3.8.19	49,01
10.2.3.4	29,60	2.3.8.20	171,48
9.2.3.11	22,02	2.3.8.6	72,18
9.2.3.8	101,91	13.4.5.14	119,71
9.2.3.4	144,40	13.4.5.6	122,22
1.2.3.11	144,72	12.4.5.15	119,71
1.2.3.8	20,79	12.4.5.6	118,07
1.2.3.4	92,90	3.4.5.15	122,22
11.3.4.12	30,60	3.4.5.14	118,07
11.3.4.5	148,66	23.22.1.2	22,99
11.3.4.13	89,12	23.22.1.6	71,88
8.3.4.12	89,16	23.22.1.21	137,59
8.3.4.5	28,91		

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	5,256
Wb . .	10,962
Wd . .	13,817
ΣW . .	30,035

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	4,713
O_{22}---C_7	2,453
O_{22}---H_{13}	4,849
H_{23}---C_7	2,882

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

bicyclo (3.2.1) octanol-3

cycle hexagonal bateau

16 variables

isomère exo

fonctions du tableau 8

FIGURE : 234

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,269	0,858	0
3	1,173	2,034	- 0,984
4	0,768	1,548	- 2,387
5	- 0,768	1,548	- 2,387
6	- 1,173	2,034	- 0,984
7	- 1,269	0,858	0
8	0	2,933	- 0,555
9	1,442	1,257	1,032
10	2,157	0,223	- 0,252
11	2,124	2,601	1,019
12	1,137	2,244	- 3,138
13	1,178	0,565	- 2,614
14	- 1,137	2,244	- 3,138
15	- 1,178	0,565	- 2,614
16	- 2,124	2,601	- 1,019
17	- 1,442	1,257	1,032
18	- 2,157	0,223	- 0,252
19	0	3,139	0,514
20	0	3,874	- 1,103
21	0	- 0,618	- 0,934
22	0	- 0,906	1,088
23	0,669	- 1,494	0,754

Angles (d°)	
2.1.7	111,89
1.2.3	112,13
2.3.4	111,02
1.22.23	97,19
2.3.8	108,48
3.8.6	99,31
1.2.9	109,10
1.2.10	109,83
2.3.11	111,00
2.8.20	111,40
19.8.3	112,58
12.4.3	109,78
13.4.3	112,11
21.1.2	107,98
22.1.2	110,99
4.3.8	103,75
8.3.11	111,35
12.4.13	107,80
9.2.10	106,69
19.8.20	109,32
21.1.22	106,77
3.4.5	105,26

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	47,34	8.3.4.13	150,48
22.1.2.3	168,32	2.3.4.12	153,93
22.1.2.10	69,27	2.3.4.5	87,98
21.1.2.9	164,05	2.3.4.13	34,15
21.1.2.3	74,97	4.3.8.19	164,36
21.1.2.10	47,44	4.3.8.20	72,43
7.1.2.9	77,25	4.3.8.6	45,04
7.1.2.3	43,74	11.3.8.19	76,19
7.1.2.10	166,14	11.3.8.20	47,03
10.2.3.11	53,77	11.3.8.6	164,50
10.2.3.8	176,42	2.3.8.19	46,24
10.2.3.4	70,20	2.3.8.20	169,46
9.2.3.11	62,85	2.3.8.6	73,07
9.2.3.8	59,80	13.4.5.14	119,78
9.2.3.4	173,19	13.4.5.6	122,13
1.2.3.11	176,17	12.4.5.15	119,78
1.2.3.8	61,18	12.4.5.6	118,09
1.2.3.4	52,21	3.4.5.15	122,13
11.3.4.12	29,96	3.4.5.14	118,09
11.3.4.5	148,05	23.22.1.2	72,34
11.3.4.13	89,82	23.22.1.6	173,64
8.3.4.12	89,74	23.22.1.21	45,11
8.3.4.5	28,35		

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	2,979
Wb . .	9,769
Wd . .	7,271
ΣW . .	20,020

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	3,980
O_{22}---C_7	2,430
O_{22}---H_{13}	4,155
H_{23}---C_7	3,140

$\Delta\theta_{2.1.7}$	20"
ΔW	10^{-3} kcal

bicyclo (3.2.1) octanol-3

cycle hexagonal chaise

isomère exo

16 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 235

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,287	0,831	0
3	1,175	2,115	0,835
4	0,768	3,304	- 0,054
5	- 0,768	3,304	- 0,054
6	- 1,175	2,115	0,835
7	- 1,287	0,831	0
8	0	1,992	1,821
9	2,128	0,206	0,397
10	1,570	1,088	- 1,053
11	2,130	2,326	1,355
12	1,137	4,232	0,380
13	1,178	3,224	- 1,059
14	- 1,137	4,232	0,380
15	- 1,178	3,224	- 1,059
16	- 2,130	2,326	1,355
17	- 2,128	0,206	0,397
18	- 1,570	1,088	- 1,053
19	0	1,055	2,376
20	0	2,817	2,532
21	0	- 0,641	- 0,918
22	0	- 0,903	1,091
23	0,667	- 1,496	0,759

Angles (d°)	
2.1.7	114,34
1.2.3	113,08
2.3.4	110,57
1.22.23	97,42
2.3.8	109,71
3.8.6	99,57
1.2.9	109,18
1.2.10	109,70
2.3.11	110,61
2.8.20	110,97
19.8.3	113,27
12.4.3	109,82
13.4.3	112,14
21.1.2	108,09
22.1.2	110,22
4.3.8	103,27
8.3.11	111,87
12.4.13	107,59
9.2.10	105,74
19.8.20	108,62
21.1.22	105,45
3.4.5	105,34

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	33,16	8.3.4.13	150,81
22.1.2.3	88,60	2.3.4.12	153,07
22.1.2.10	148,61	2.3.4.5	88,73
21.1.2.9	81,60	2.3.4.13	33,51
21.1.2.3	156,63	4.3.8.19	166,14
21.1.2.10	33,84	4.3.8.20	71,38
7.1.2.9	157,98	4.3.8.6	45,57
7.1.2.3	36,22	11.3.8.19	74,89
7.1.2.10	86,58	11.3.8.20	47,59
10.2.3.11	93,98	11.3.8.6	164,54
10.2.3.8	142,15	2.3.8.19	48,24
10.2.3.4	28,89	2.3.8.20	170,72
9.2.3.11	21,47	2.3.8.6	72,33
9.2.3.8	102,41	13.4.5.14	119,56
9.2.3.4	144,33	13.4.5.6	122,24
1.2.3.11	143,23	12.4.5.15	119,56
1.2.3.8	19,35	12.4.5.6	118,20
1.2.3.4	93,91	3.4.5.15	122,24
11.3.4.12	30,20	3.4.5.14	118,20
11.3.4.5	148,40	23.22.1.2	71,51
11.3.4.13	89,36	23.22.1.6	163,61
8.3.4.12	89,63	23.22.1.21	44,92
8.3.4.5	28,56		

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	4,831
Wb . .	10,064
Wd . .	12,387
ΣW . .	27,282

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	5,084
O_{22}---C_7	2,419
O_{22}---H_{13}	4,800
H_{23}---C_7	3,132

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	10^{-3} kcal

bicyclo (3.2.1) octanol-3

cycle hexagonal bateau

isomère exo

16 variables

fonctions du tableau 8

FIGURE : 236

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,264	0,865	0
3	1,164	2,138	- 0,853
4	0,768	1,852	- 2,313
5	- 0,768	1,852	- 2,313
6	- 1,164	2,138	- 0,853
7	- 1,264	0,865	0
8	0	2,993	- 0,321
9	1,486	1,165	1,056
10	2,143	0,254	- 0,331
11	2,116	2,704	- 0,816
12	1,132	2,655	- 2,953
13	1,190	0,922	- 2,690
14	- 1,132	2,655	- 2,953
15	- 1,190	0,922	- 2,690
16	- 2,116	2,704	- 0,816
17	- 1,486	1,165	1,056
18	- 2,143	0,254	- 0,331
19	0	3,081	0,764
20	0	3,988	- 0,765
21	0	- 1,228	1,476
22	0	- 0,943	- 1,057
23	0,650	- 0,529	- 1,616

méthyl-3 bicyclo (3.2.1) octanol-3

cycle hexagonal chaise

16 variables

isomère endo

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.7	111,23
1.2.3	114,48
2.3.4	112,93
1.22.23	98,56
2.3.8	108,52
3.8.6	98,30
1.2.9	108,33
1.2.10	109,84
2.3.11	110,37
2.8.20	111,49
19.8.3	112,93
12.4.3	109,53
13.4.3	112,78
21.1.2	111,17
22.1.2	112,08
4.3.8	103,66
8.3.11	110,80
12.4.13	107,26
9.2.10	105,63
19.8.20	109,38
21.1.22	98,52
3.4.5	104,92

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	9,007
Wb . .	12,914
Wd . .	9,206
ΣW . .	31,128

$\Delta\theta_{2.1.7}$	7'
ΔW	10^{-2} kcal

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	150,26	8.3.4.13	152,63
22.1.2.3	88,75	2.3.4.12	154,76
22.1.2.10	35,35	2.3.4.5	87,74
21.1.2.9	41,08	2.3.4.13	35,39
21.1.2.3	162,08	4.3.8.19	165,96
21.1.2.10	73,83	4.3.8.20	70,42
7.1.2.9	83,37	4.3.8.6	46,68
7.1.2.3	37,62	11.3.8.19	75,65
7.1.2.10	161,72	11.3.8.20	47,98
10.2.3.11	55,14	11.3.8.6	165,07
10.2.3.8	176,73	2.3.8.19	45,68
10.2.3.4	68,93	2.3.8.20	169,30
9.2.3.11	59,77	2.3.8.6	73,60
9.2.3.8	61,82	13.4.5.14	119,37
9.2.3.4	176,16	13.4.5.6	123,13
1.2.3.11	179,25	12.4.5.15	119,37
1.2.3.8	59,17	12.4.5.6	117,50
1.2.3.4	55,17	3.4.5.15	123,13
11.3.4.12	30,69	3.4.5.14	117,50
11.3.4.5	148,19	23.22.1.2	19,30
11.3.4.13	88,68	23.22.1.6	71,93
8.3.4.12	87,99	23.22.1.21	136,35
8.3.4.5	29,50		

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	1,884
O_{22}---C_7	2,446
O_{22}---H_{13}	2,749
H_{23}---C_7	2,867

FIGURE : 237

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,275	0,849	0
3	1,167	2,193	0,737
4	0,768	3,311	- 0,242
5	- 0,768	3,311	- 0,242
6	- 1,167	2,193	0,737
7	- 1,275	0,849	0
8	0	2,167	1,740
9	2,134	0,255	0,405
10	1,573	1,047	- 1,061
11	2,129	2,439	1,229
12	1,136	4,268	0,122
13	1,183	3,159	- 1,237
14	- 1,136	4,268	0,122
15	- 1,183	3,159	- 1,237
16	- 2,129	2,439	1,229
17	- 2,134	0,255	0,405
18	- 1,573	1,047	- 1,061
19	0	1,315	2,418
20	0	3,074	2,343
21	0	- 1,314	1,400
22	0	- 0,879	- 1,110
23	0,552	- 0,384	- 1,707

méthyl-3 bicyclo (3.2.1) octanol-3

cycle hexagonal bateau

16 variables

isomère endo

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.7	112,66
1.2.3	115,23
2.3.4	110,38
1.22.23	99,72
2.3.8	110,59
3.8.6	98,62
1.2.9	110,13
1.2.10	108,61
2.3.11	110,24
2.8.20	110,32
19.8.3	114,75
12.4.3	109,78
13.4.3	112,41
21.1.2	112,29
22.1.2	110,13
4.3.8	103,31
8.3.11	111,90
12.4.13	107,43
9.2.10	103,46
19.8.20	107,86
21.1.22	98,46
3.4.5	105,02

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	10,693
Wb . .	13,462
Wd . .	13,379
ΣW . .	37,535

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2'
ΔW	10^{-2}kcal

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	79,28	8.3.4.13	152,04
22.1.2.3	155,42	2.3.4.12	153,30
22.1.2.10	33,36	2.3.4.5	88,74
21.1.2.9	29,35	2.3.4.13	33,79
21.1.2.3	95,95	4.3.8.19	169,30
21.1.2.10	142,00	4.3.8.20	68,64
7.1.2.9	157,34	4.3.8.6	46,87
7.1.2.3	32,04	11.3.8.19	72,13
7.1.2.10	90,02	11.3.8.20	49,93
10.2.3.11	92,58	11.3.8.6	165,44
10.2.3.8	143,14	2.3.8.19	51,19
10.2.3.4	29,45	2.3.8.20	173,26
9.2.3.11	20,07	2.3.8.6	71,23
9.2.3.8	104,22	13.4.5.14	119,52
9.2.3.4	142,09	13.4.5.6	122,53
1.2.3.11	145,37	12.4.5.15	119,52
1.2.3.8	21,08	12.4.5.6	117,96
1.2.3.4	92,61	3.4.5.15	122,53
11.3.4.12	31,28	3.4.5.14	117,96
11.3.4.5	149,24	23.22.1.2	26,39
11.3.4.13	88,24	23.22.1.6	78,80
8.3.4.12	88,44	23.22.1.21	143,97
8.3.4.5	29,52		

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	3,629
O_{22}---C_7	2,418
O_{22}---H_{13}	4,209
H_{23}---C_7	2,788

FIGURE : 238

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,264	0,866	0
3	1,169	2,091	- 0,921
4	0,768	1,701	- 2,355
5	- 0,768	1,701	- 2,355
6	- 1,169	2,091	- 0,921
7	- 1,264	0,866	0
8	0	2,968	- 0,438
9	1,462	1,215	1,046
10	2,146	0,242	- 0,296
11	2,123	2,654	- 0,922
12	1,135	2,450	- 3,055
13	1,183	0,741	- 2,655
14	- 1,135	2,450	- 3,055
15	- 1,183	0,741	- 2,655
16	- 2,123	2,654	- 0,922
17	- 1,462	1,215	1,046
18	- 2,146	0,242	- 0,296
19	0	3,127	0,639
20	0	3,933	- 0,942
21	0	- 1,203	1,497
22	0	- 0,733	- 1,211
23	0,705	- 1,356	- 1,064

méthyl-3 bicyclo (3.2.1) octanol-3

cycle hexagonal chaise

16 variables

isomère endo

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.7	111,19
1.2.3	113,57
2.3.4	111,88
1.22.23	101,90
2.3.8	108,26
3.8.6	98,85
1.2.9	108,80
1.2.10	109,56
2.3.11	110,64
2.8.20	111,08
19.8.3	113,18
12.4.3	109,69
13.4.3	112,42
21.1.2	110,73
22.1.2	107,01
4.3.8	103,82
8.3.11	111,41
12.4.13	107,51
9.2.10	106,29
19.8.20	109,18
21.1.22	110,03
3.4.5	105,10

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	10,640
Wb . .	11,359
Wd . .	7,513
ΣW . .	29,513

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2'
ΔW	$5\ 10^{-3}$ kcal

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	163,00	8.3.4.13	151,36
22.1.2.3	75,68	2.3.4.12	154,40
22.1.2.10	47,19	2.3.4.5	87,75
21.1.2.9	43,09	2.3.4.13	34,84
21.1.2.3	164,40	4.3.8.19	165,59
21.1.2.10	72,72	4.3.8.20	71,16
7.1.2.9	80,46	4.3.8.6	45,59
7.1.2.3	40,86	11.3.8.19	75,31
7.1.2.10	163,73	11.3.8.20	47,94
10.2.3.11	54,39	11.3.8.6	164,69
10.2.3.8	176,74	2.3.8.19	46,57
10.2.3.4	69,47	2.3.8.20	169,81
9.2.3.11	61,42	2.3.8.6	73,43
9.2.3.8	60,92	13.4.5.14	119,56
9.2.3.4	174,72	13.4.5.6	122,59
1.2.3.11	177,27	12.4.5.15	119,56
1.2.3.8	60,39	12.4.5.6	117,86
1.2.3.4	53,40	3.4.5.15	122,59
11.3.4.12	30,54	3.4.5.14	117,86
11.3.4.5	148,39	23.22.1.2	71,20
11.3.4.13	89,02	23.22.1.6	158,13
8.3.4.12	89,09	23.22.1.21	49,16
8.3.4.5	28,77		

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	2,675
O_{22}---C_7	2,371
O_{22}---H_{13}	2,379
H_{23}---C_7	3,153

FIGURE : 239

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,277	0,846	0
3	1,168	2,196	0,724
4	0,768	3,307	- 0,263
5	- 0,768	3,307	- 0,263
6	- 1,168	2,196	0,724
7	- 1,277	0,846	0
8	0	2,182	1,726
9	2,131	0,254	0,417
10	1,574	1,038	- 1,063
11	2,127	2,447	1,219
12	1,136	4,268	0,094
13	1,182	3,147	- 1,257
14	- 1,136	4,268	0,094
15	- 1,182	3,147	- 1,257
16	- 2,127	2,447	1,219
17	- 2,131	0,254	0,417
18	- 1,574	1,038	- 1,063
19	0	1,338	2,414
20	0	3,095	2,320
21	0	- 1,305	1,408
22	0	- 0,660	- 1,253
23	0,749	- 1,240	- 1,162

méthyl-3 bicyclo (3.2.1) octanol-3

cycle hexagonal bateau

16 variables

isomère endo

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.7	112,95
1.2.3	115,23
2.3.4	110,54
1.22.23	101,55
2.3.8	110,66
3.8.6	98,74
1.2.9	110,11
1.2.10	108,39
2.3.11	110,38
2.8.20	110,36
19.8.3	114,73
12.4.3	109,78
13.4.3	112,36
21.1.2	112,05
22.1.2	104,92
4.3.8	103,11
8.3.11	111,57
12.4.13	107,50
9.2.10	103,99
19.8.20	107,73
21.1.22	109,38
3.4.5	105,06

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	12,034
Wb . .	12,839
Wd . .	12,834
ΣW . .	37,708

$\Delta\theta_{2.1.7}$	1"
ΔW	10^{-5} kcal

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	89,62	8.3.4.13	152,04
22.1.2.3	145,12	2.3.4.12	153,30
22.1.2.10	23,52	2.3.4.5	88,73
21.1.2.9	28,96	2.3.4.13	33,73
21.1.2.3	96,29	4.3.8.19	169,52
21.1.2.10	142,11	4.3.8.20	68,57
7.1.2.9	156,65	4.3.8.6	47,05
7.1.2.3	31,40	11.3.8.19	72,02
7.1.2.10	90,20	11.3.8.20	49,89
10.2.3.11	92,99	11.3.8.6	165,52
10.2.3.8	143,00	2.3.8.19	51,30
10.2.3.4	29,41	2.3.8.20	173,22
9.2.3.11	20,15	2.3.8.6	71,16
9.2.3.8	103,86	13.4.5.14	119,56
9.2.3.4	142,55	13.4.5.6	122,46
1.2.3.11	145,40	12.4.5.15	119,56
1.2.3.8	21,39	12.4.5.6	117,98
1.2.3.4	92,20	3.4.5.15	122,46
11.3.4.12	30,90	3.4.5.14	117,98
11.3.4.5	148,87	23.22.1.2	66,91
11.3.4.13	88,67	23.22.1.6	162,57
8.3.4.12	88,40	23.22.1.21	53,46
8.3.4.5	29,58		

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	4,410
O_{22}---C_7	2,339
O_{22}---H_{13}	3,987
H_{23}---C_7	3,132

FIGURE : 240

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,276	0,848	0
3	1,168	2,167	- 0,779
4	0,768	1,954	- 2,250
5	- 0,768	1,954	- 2,250
6	- 1,168	2,167	- 0,779
7	- 1,276	0,848	0
8	0	2,979	- 0,093
9	1,512	1,102	1,065
10	2,155	0,247	- 0,350
11	2,120	2,731	- 0,716
12	1,129	2,791	- 2,847
13	1,187	1,041	- 2,670
14	- 1,129	2,791	- 2,847
15	- 1,187	1,041	- 2,670
16	- 2,120	2,731	- 0,716
17	- 1,512	1,102	1,065
18	- 2,155	0,247	- 0,350
19	0	2,980	0,896
20	0	4,004	- 0,560
21	0	- 1,322	- 1,392
22	0	- 0,868	1,119
23	0,637	- 0,410	1,657

méthyl-3 bicyclo (3.2.1) octanol-3

cycle hexagonal chaise

16 variables

isomère exo

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.7	112,82
1.2.3	114,63
2.3.4	112,61
1.22.23	98,74
2.3.8	108,26
3.8.6	98,78
1.2.9	107,56
1.2.10	110,90
2.3.11	110,37
2.8.20	111,62
19.8.3	112,41
12.4.3	109,34
13.4.3	112,62
21.1.2	112,39
22.1.2	109,83
4.3.8	103,85
8.3.11	111,20
12.4.13	107,79
9.2.10	104,70
19.8.20	109,68
21.1.22	98,67
3.4.5	105,08

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	10,579
Wb . .	12,751
Wd . .	10,093
ΣW . .	33,423

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2'
ΔW	10^{-2} kcal

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	37,27	8.3.4.13	151,74
22.1.2.3	156,81	2.3.4.12	154,65
22.1.2.10	76,66	2.3.4.5	88,08
21.1.2.9	146,05	2.3.4.13	34,85
21.1.2.3	94,41	4.3.8.19	164,38
21.1.2.10	32,11	4.3.8.20	71,90
7.1.2.9	85,61	4.3.8.6	45,63
7.1.2.3	33,92	11.3.8.19	76,92
7.1.2.10	160,45	11.3.8.20	46,80
10.2.3.11	54,62	11.3.8.6	164,33
10.2.3.8	176,54	2.3.8.19	44,48
10.2.3.4	69,22	2.3.8.20	168,21
9.2.3.11	59,32	2.3.8.6	74,26
9.2.3.8	62,60	13.4.5.14	119,80
9.2.3.4	176,84	13.4.5.6	122,94
1.2.3.11	178,86	12.4.5.15	119,80
1.2.3.8	56,94	12.4.5.6	117,27
1.2.3.4	57,30	3.4.5.15	122,94
11.3.4.12	30,81	3.4.5.14	117,27
11.3.4.5	148,08	23.22.1.2	19,70
11.3.4.13	88,99	23.22.1.6	86,05
8.3.4.12	88,46	23.22.1.21	137,39
8.3.4.5	28,81		

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	4,598
O_{22}---C_7	2,413
O_{22}---H_{13}	4,406
H_{23}---C_7	2,826

FIGURE : 241

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,274	0,852	0
3	1,169	2,156	0,804
4	0,768	3,322	- 0,118
5	- 0,768	3,322	- 0,118
6	- 1,169	2,156	0,804
7	- 1,274	0,852	0
8	0	2,081	1,802
9	2,124	0,241	0,397
10	1,557	1,091	- 1,057
11	2,129	2,377	1,312
12	1,136	4,261	0,294
13	1,180	3,215	- 1,120
14	- 1,136	4,261	0,294
15	- 1,180	3,215	- 1,120
16	- 2,129	2,377	1,312
17	- 2,124	0,241	0,397
18	- 1,557	1,091	- 1,057
19	0	1,189	2,427
20	0	2,952	2,455
21	0	- 1,264	- 1,445
22	0	- 0,901	1,092
23	0,651	- 0,473	1,639

méthyl-3 bicyclo (3.2.1) octanol-3

cycle hexagonal bateau

16 variables

isomère exo

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.7	112,46
1.2.3	114,56
2.3.4	110,35
1.22.23	99,05
2.3.8	110,45
3.8.6	98,84
1.2.9	109,20
1.2.10	109,22
2.3.11	110,47
2.8.20	110,48
19.8.3	114,38
12.4.3	109,78
13.4.3	112,21
21.1.2	111,46
22.1.2	110,71
4.3.8	103,17
8.3.11	111,74
12.4.13	107,75
9.2.10	105,01
19.8.20	108,08
21.1.22	99,32
3.4.5	105,10

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	9,947
Wb . .	12,480
Wd . .	13,143
ΣW . .	35,570

$\Delta\theta_{2.1.7}$	20"
ΔW	$2\ 10^{-3}$ kcal

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	33,49	8.3.4.13	151,64
22.1.2.3	89,32	2.3.4.12	153,43
22.1.2.10	147,82	2.3.4.5	88,58
21.1.2.9	76,06	2.3.4.13	33,64
21.1.2.3	161,13	4.3.8.19	168,76
21.1.2.10	38,26	4.3.8.20	69,04
7.1.2.9	157,93	4.3.8.6	46,81
7.1.2.3	35,12	11.3.8.19	72,57
7.1.2.10	87,75	11.3.8.20	49,64
10.2.3.11	93,61	11.3.8.6	165,49
10.2.3.8	142,27	2.3.8.19	50,82
10.2.3.4	28,84	2.3.8.20	173,03
9.2.3.11	20,71	2.3.8.6	71,12
9.2.3.8	103,41	13.4.5.14	119,79
9.2.3.4	143,16	13.4.5.6	122,21
1.2.3.11	143,52	12.4.5.15	119,79
1.2.3.8	19,40	12.4.5.6	118,00
1.2.3.4	94,03	3.4.5.15	122,21
11.3.4.12	30,98	3.4.5.14	118,00
11.3.4.5	148,98	23.22.1.2	18,88
11.3.4.13	88,81	23.22.1.6	72,09
8.3.4.12	88,57	23.22.1.21	136,17
8.3.4.5	29,42		

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	4,636
O_{22}---C_7	2,426
O_{22}---H_{13}	4,819
H_{23}---C_7	2,854

FIGURE : 242

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,272	0,854	0
3	1,167	2,183	- 0,763
4	0,768	1,992	- 2,237
5	- 0,768	1,992	- 2,237
6	- 1,167	2,183	- 0,763
7	- 1,272	0,854	0
8	0	2,991	- 0,168
9	1,510	1,099	1,067
10	2,150	0,259	- 0,359
11	2,119	2,747	- 0,690
12	1,130	2,835	- 2,823
13	1,192	1,091	- 2,677
14	- 1,130	2,835	- 2,823
15	- 1,192	1,091	- 2,677
16	- 2,119	2,747	- 0,690
17	- 1,510	1,099	1,067
18	- 2,150	0,259	- 0,359
19	0	3,006	0,921
20	0	4,014	- 0,542
21	0	- 1,315	- 1,399
22	0	- 0,650	1,258
23	0,734	- 1,249	1,169

méthyl-3 bicyclo (3.2.1) octanol-3

cycle hexagonal chaise

16 variables

isomère exo

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.7	112,21
1.2.3	115,22
2.3.4	112,67
1.22.23	101,90
2.3.8	108,29
3.8.6	98,65
1.2.9	107,35
1.2.10	110,75
2.3.11	110,42
2.8.20	111,13
19.8.3	113,16
12.4.3	109,43
13.4.3	112,91
21.1.2	112,46
22.1.2	104,83
4.3.8	103,81
8.3.11	111,04
12.4.13	107,09
9.2.10	104,76
19.8.20	109,31
21.1.22	109,45
3.4.5	105,03

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	11,003
Wb . .	12,923
Wd . .	9,005
ΣW . .	32,931

$\Delta\theta_{2.1.7}$	20"
ΔW	$2\ 10^{-3}$ kcal

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	26,98	8.3.4.13	152,43
22.1.2.3	146,49	2.3.4.12	154,67
22.1.2.10	86,83	2.3.4.5	87,94
21.1.2.9	145,81	2.3.4.13	35,50
21.1.2.3	94,68	4.3.8.19	165,76
21.1.2.10	32,00	4.3.8.20	70,82
7.1.2.9	86,22	4.3.8.6	45,90
7.1.2.3	33,29	11.3.8.19	75,59
7.1.2.10	159,97	11.3.8.20	47,83
10.2.3.11	54,77	11.3.8.6	164,56
10.2.3.8	176,55	2.3.8.19	45,80
10.2.3.4	69,22	2.3.8.20	169,23
9.2.3.11	59,04	2.3.8.6	74,05
9.2.3.8	62,73	13.4.5.14	119,17
9.2.3.4	176,97	13.4.5.6	123,45
1.2.3.11	178,56	12.4.5.15	119,17
1.2.3.8	56,78	12.4.5.6	117,38
1.2.3.4	57,46	3.4.5.15	123,45
11.3.4.12	30,69	3.4.5.14	117,38
11.3.4.5	148,07	23.22.1.2	68,84
11.3.4.13	88,48	23.22.1.6	164,29
8.3.4.12	88,40	23.22.1.21	52,00
8.3.4.5	28,99		

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	4,525
O_{22}---C_7	2,337
O_{22}---H_{13}	4,465
H_{23}---C_7	3,133

FIGURE : 243

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,269	0,858	0
3	1,167	2,134	0,849
4	0,768	3,330	- 0,034
5	- 0,768	3,330	- 0,034
6	- 1,167	2,134	0,849
7	- 1,269	0,858	0
8	0	2,027	1,846
9	2,123	0,240	0,379
10	1,542	1,127	- 1,052
11	2,128	2,335	1,362
12	1,139	4,255	0,405
13	1,177	3,251	- 1,040
14	- 1,139	4,255	0,405
15	- 1,177	3,251	- 1,040
16	- 2,128	2,335	1,362
17	- 2,123	0,240	0,379
18	- 1,542	1,127	- 1,052
19	0	1,118	2,445
20	0	2,880	2,524
21	0	- 1,236	- 1,469
22	0	- 0,710	1,225
23	0,742	- 1,295	1,111

méthyl-3 bicyclo (3.2.1) octanol-3

cycle hexagonal bateau

16 variables

isomère exo

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
2.1.7	111,88
1.2.3	114,23
2.3.4	110,24
1.22.23	101,81
2.3.8	110,53
3.8.6	98,66
1.2.9	108,80
1.2.10	109,65
2.3.11	110,46
2.8.20	110,42
19.8.3	114,47
12.4.3	109,92
13.4.3	112,08
21.1.2	111,14
22.1.2	106,31
4.3.8	103,22
8.3.11	111,73
12.4.13	107,81
9.2.10	105,33
19.8.20	108,18
21.1.22	109,82
3.4.5	105,04

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	11,413
Wb . .	11,981
Wd . .	11,561
ΣW . .	34,955

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2'
ΔW	$2\ 10^{-3}$ kcal

Dièdres (d°)			
22.1.2.9	43,42	8.3.4.13	151,49
22.1.2.3	78,35	2.3.4.12	153,28
22.1.2.10	158,13	2.3.4.5	88,52
21.1.2.9	76,05	2.3.4.13	33,41
21.1.2.3	162,19	4.3.8.19	168,95
21.1.2.10	38,67	4.3.8.20	68,70
7.1.2.9	159,07	4.3.8.6	46,97
7.1.2.3	37,30	11.3.8.19	72,36
7.1.2.10	86,22	11.3.8.20	49,99
10.2.3.11	94,08	11.3.8.6	165,66
10.2.3.8	141,74	2.3.8.19	51,08
10.2.3.4	28,27	2.3.8.20	173,43
9.2.3.11	20,63	2.3.8.6	70,90
9.2.3.8	103,54	13.4.5.14	119,87
9.2.3.4	142,98	13.4.5.6	121,93
1.2.3.11	142,40	12.4.5.15	119,87
1.2.3.8	182,23	12.4.5.6	118,20
1.2.3.4	95,25	3.4.5.15	121,93
11.3.4.12	30,94	3.4.5.14	118,20
11.3.4.5	149,13	23.22.1.2	67,51
11.3.4.13	88,94	23.22.1.6	154,37
8.3.4.12	88,64	23.22.1.21	52,82
8.3.4.5	29,56		

Distances (Å)	
H_{23}---H_{13}	5,048
O_{22}---C_7	2,360
O_{22}---H_{13}	4,712
H_{23}---C_7	3,149

FIGURE : 244

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,280	0,842	0
3	1,176	2,060	- 0,930
4	0,665	1,628	- 2,274
5	- 0,665	1,628	- 2,274
6	- 1,176	2,060	- 0,930
7	- 1,280	0,842	0
8	0	2,924	- 0,442
9	1,483	1,196	1,043
10	2,155	0,209	- 0,294
11	2,119	2,640	- 0,991
12	1,304	1,359	- 3,112
13	- 1,304	1,359	- 3,112
14	- 2,119	2,640	- 0,991
15	- 1,483	1,196	1,043
16	- 2,155	0,209	- 0,294
17	0	3,085	0,635
18	0	3,892	- 0,942
19	0	- 0,636	0,922
20	0	- 0,865	- 1,121
21	0,785	- 1,357	- 0,902

bicyclo (3.2.1) octène-6, o1-3

cycle hexagonal chaise

isomère endo

15 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
7.2.1	113,31
1.2.3	112,31
2.3.4	109,68
1.20.21	97,68
2.3.8	107,74
3.8.6	99,71
9.2.1	108,98
10.2.1	110,00
11.3.2	113,00
17.8.3	110,69
17.8.18	108,83
12.4.5	125,95
20.1.2	109,62
19.1.2	108,19
19.1.20	107,74
3.4.12	124,15
4.3.8	100,67
11.3.8	111,96
9.2.10	106,37
3.8.18	113,35
3.4.5	109,90

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	3,213
Wb . .	21,183
Wd . .	4,370
ΣW . .	28,767

$\Delta\theta_{2.1.7}$	1"
ΔW	10^{-4} kcal

Dièdres (d°)			
19.1.2.9	39,97	11.3.4.12	34,00
19.1.2.3	160,84	8.3.4.12	153,57
19.1.2.10	76,28	2.3.4.12	93,06
20.1.2.9	157,21	11.3.4.5	146,00
20.1.2.3	81,92	8.3.4.5	26,43
20.1.2.10	40,96	2.3.4.5	86,94
7.1.2.9	79,99	4.3.8.17	161,27
7.1.2.3	40,88	4.3.8.18	76,12
7.1.2.10	163,76	4.3.8.6	40,48
10.2.3.11	53,29	11.3.8.17	78,42
10.2.3.8	177,51	11.3.8.18	44,19
10.2.3.4	73,78	11.3.8.6	160,80
9.2.3.11	62,97	2.3.8.17	46,43
9.2.3.8	61,25	2.3.8.18	169,04
9.2.3.4	169,97	2.3.8.6	74,36
1.2.3.11	176,17	21.20.1.2	61,20
1.2.3.8	59,61	21.20.1.19	56,32
1.2.3.4	49,10	21.20.1.7	173,84

Distances (Å)	
O_{20}---C_4	2,826
O_{20}---H_{12}	3,257
H_{21}---C_4	3,287
H_{21}---H_{12}	3,540

FIGURE : 245

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,284	0,836	0
3	1,177	2,114	0,845
4	0,665	3,218	- 0,034
5	- 0,665	3,218	- 0,034
6	- 1,177	2,114	0,845
7	- 1,284	0,836	0
8	0	1,964	1,825
9	2,127	0,210	0,389
10	1,550	1,108	- 1,053
11	2,127	2,375	1,352
12	1,302	3,908	- 0,584
13	- 1,302	3,908	- 0,584
14	- 2,127	2,375	1,352
15	- 2,124	0,210	0,389
16	- 1,550	1,108	- 1,053
17	0	1,024	2,375
18	0	2,781	2,545
19	0	- 0,617	0,935
20	0	- 0,887	- 1,104
21	0,782	- 1,380	- 0,874

bicyclo (3.2.1) octène-6, o1-3

cycle hexagonal bateau

isomère endo

15 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
7.2.1	113,85
1.2.3	113,31
2.3.4	108,29
1.20.21	97,84
2.3.8	108,82
3.8.6	99,73
9.2.1	109,04
10.2.1	109,38
11.3.2	112,79
17.8.3	110,36
17.8.18	108,30
12.4.5	125,83
20.1.2	110,00
19.1.2	107,49
19.1.20	107,79
3.4.12	124,26
4.3.8	100,64
11.3.8	112,76
9.2.10	106,47
3.8.18	113,96
3.4.5	109,91

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	2,830
Wb . .	21,540
Wd . .	7,882
ΣW . .	32,253

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	$2\ 10^{-3}$ kcal

Dièdres (d°)			
19.1.2.9	39,48	11.3.4.12	33,16
19.1.2.3	82,15	8.3.4.12	153,56
19.1.2.10	155,54	2.3.4.12	92,38
20.1.2.9	77,62	11.3.4.5	146,84
20.1.2.3	160,76	8.3.4.5	26,44
20.1.2.10	38,44	2.3.4.5	87,62
7.1.2.9	158,42	4.3.8.17	162,31
7.1.2.3	36,79	4.3.8.18	75,60
7.1.2.10	85,53	4.3.8.6	40,51
10.2.3.11	92,69	11.3.8.17	77,28
10.2.3.8	141,40	11.3.8.18	44,81
10.2.3.4	32,85	11.3.8.6	160,92
9.2.3.11	23,36	2.3.8.17	48,64
9.2.3.8	102,55	2.3.8.18	170,74
9.2.3.4	148,90	2.3.8.6	73,16
1.2.3.11	144,99	21.20.1.2	60,92
1.2.3.8	19,08	21.20.1.19	55,99
1.2.3.4	89,47	21.20.1.7	172,90

Distances (Å)	
O_{20}---C_4	4,294
O_{20}---H_{12}	4,996
H_{21}---C_4	4,676
H_{21}---H_{12}	5,322

FIGURE : 246

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,273	0,853	0
3	1,173	2,077	- 0,922
4	0,665	1,662	- 2,272
5	- 0,665	1,662	- 2,272
6	- 1,173	2,077	- 0,922
7	- 1,273	0,853	0
8	0	2,945	- 0,432
9	1,465	1,207	1,045
10	2,155	0,226	- 0,288
11	2,117	2,654	- 0,975
12	1,303	1,403	- 3,115
13	- 1,303	1,403	- 3,115
14	- 2,117	2,654	- 0,975
15	- 1,465	1,207	1,045
16	- 2,155	0,226	- 0,288
17	0	3,097	0,647
18	0	3,914	- 0,928
19	0	- 0,624	0,930
20	0	- 0,942	- 1,057
21	0,773	- 0,650	- 1,530

bicyclo (3.2.1) octène-6, o1-3

cycle hexagonal chaise

isomère endo

15 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
7.2.1	112,34
1.2.3	112,94
2.3.4	109,98
1.20.21	99,59
2.3.8	107,91
3.8.6	99,30
9.2.1	108,61
10.2.1	110,05
11.3.2	112,88
17.8.3	110,87
17.8.18	109,06
12.4.5	125,86
20.1.2	111,73
19.1.2	108,06
19.1.20	104,46
3.4.12	124,39
4.3.8	100,66
11.3.8	111,80
9.2.10	106,34
3.8.18	113,25
3.4.5	109,76

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	3,850
Wb . .	22,041
Wd . .	7,104
ΣW . .	32,995

$\Delta\theta_{2.1.7}$	20"
ΔW	0,04 kcal

Dièdres (d°)			
19.1.2.9	39,26	11.3.4.12	33,76
19.1.2.3	159,80	8.3.4.12	153,07
19.1.2.10	76,77	2.3.4.12	93,27
20.1.2.9	153,64	11.3.4.5	146,24
20.1.2.3	85,82	8.3.4.5	26,93
20.1.2.10	37,61	2.3.4.5	86,73
7.1.2.9	79,86	4.3.8.17	161,55
7.1.2.3	40,68	4.3.8.18	75,49
7.1.2.10	164,11	4.3.8.6	41,18
10.2.3.11	52,60	11.3.8.17	78,37
10.2.3.8	176,65	11.3.8.18	44,59
10.2.3.4	74,43	11.3.8.6	161,26
9.2.3.11	63,43	2.3.8.17	46,32
9.2.3.8	60,62	2.3.8.18	169,29
9.2.3.4	169,54	2.3.8.6	74,05
1.2.3.11	176,03	21.20.1.2	7,94
1.2.3.8	59,92	21.20.1.19	124,53
1.2.3.4	49,00	21.20.1.7	118,89

Distances (Å)	
O_{20}---C_4	2,950
O_{20}---H_{12}	3,381
H_{21}---C_4	2,431
H_{21}---H_{12}	2,648

FIGURE : 247

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,282	0,839	0
3	1,170	2,062	0,923
4	0,665	3,227	0,123
5	- 0,665	3,227	0,123
6	- 1,170	2,062	0,923
7	- 1,282	0,839	0
8	0	1,857	1,901
9	2,140	0,202	0,334
10	1,517	1,171	- 1,043
11	2,123	2,287	1,442
12	1,305	3,953	- 0,375
13	- 1,305	3,953	- 0,375
14	- 2,123	2,287	1,442
15	- 2,140	0,202	0,334
16	- 1,517	1,171	- 1,043
17	0	0,890	2,401
18	0	2,638	2,660
19	0	- 0,629	0,927
20	0	- 0,900	- 1,093
21	0,910	- 0,841	- 1,366

bicyclo (3.2.1) octène-6, o1-3

cycle hexagonal bateau

isomère endo

15 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
7.2.1	113,59
1.2.3	112,03
2.3.4	108,82
1.20.21	100,44
2.3.8	109,36
3.8.6	98,99
9.2.1	109,26
10.2.1	109,78
11.3.2	112,40
17.8.3	110,36
17.8.18	108,52
12.4.5	126,02
20.1.2	110,38
19.1.2	107,90
19.1.20	106,37
3.4.12	124,33
4.3.8	100,73
11.3.8	112,48
9.2.10	106,57
3.8.18	114,18
3.4.5	109,65

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	3,847
Wb . .	22,069
Wd . .	9,736
ΣW . .	35,653

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2'
ΔW	$4\ 10^{-2}$ kcal

Dièdres (d°)			
19.1.2.9	42,03	11.3.4.12	32,87
19.1.2.3	79,18	8.3.4.12	152,80
19.1.2.10	158,57	2.3.4.12	92,30
20.1.2.9	73,81	11.3.4.5	147,13
20.1.2.3	164,98	8.3.4.5	27,20
20.1.2.10	42,73	2.3.4.5	87,70
7.1.2.9	161,61	4.3.8.17	163,22
7.1.2.3	40,40	4.3.8.18	74,24
7.1.2.10	81,85	4.3.8.6	41,51
10.2.3.11	94,41	11.3.8.17	76,90
10.2.3.8	139,92	11.3.8.18	45,64
10.2.3.4	30,75	11.3.8.6	161,39
9.2.3.11	22,13	2.3.8.17	48,72
9.2.3.8	103,54	2.3.8.18	171,27
9.2.3.4	147,29	2.3.8.6	72,98
1.2.3.11	143,34	21.20.1.2	132,38
1.2.3.8	176,70	21.20.1.19	103,56
1.2.3.4	91,49	21.20.1.7	139,64

Distances (Å)	
O_{20}---C_4	4,354
O_{20}---H_{12}	5,077
H_{21}---C_4	4,339
H_{21}---H_{12}	4,911

FIGURE : 248

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,282	0,838	0
3	1,178	2,009	- 0,989
4	0,665	1,507	- 2,307
5	- 0,665	1,507	- 2,307
6	- 1,178	2,009	- 0,989
7	- 1,282	0,838	0
8	0	2,897	- 0,550
9	1,470	1,235	1,031
10	2,158	0,193	- 0,266
11	1,121	2,584	- 1,081
12	1,301	1,193	- 3,133
13	- 1,301	1,193	- 3,193
14	- 2,121	2,584	- 1,081
15	- 1,470	1,235	1,031
16	- 2,158	0,193	- 0,266
17	0	3,109	0,518
18	0	3,837	- 1,101
19	0	- 0,621	- 0,932
20	0	- 0,865	1,121
21	0,790	- 1,349	0,903

bicyclo (3.2.1) octène-6, o1-3

cycle hexagonal chaise

isomère exo

15 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
7.2.1	113,65
1.2.3	111,11
2.3.4	109,51
1.20.21	97,42
2.3.8	107,97
3.8.6	99,87
9.2.1	109,51
10.2.1	109,84
11.3.2	113,01
17.8.3	110,70
17.8.18	109,17
12.4.5	125,73
20.1.2	109,54
19.1.2	107,67
19.1.20	108,65
3.4.12	124,31
4.3.8	100,49
11.3.8	112,07
9.2.10	106,93
3.8.18	113,08
3.4.5	109,96

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	2,301
Wb . .	21,073
Wd . .	3,878
ΣW . .	27,252

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	$5\ 10^{-4}$ kcal

Dièdres (d°)			
19.1.2.9	163,36	11.3.4.12	33,96
19.1.2.3	75,52	8.3.4.12	153,55
19.1.2.10	46,21	2.3.4.12	92,98
20.1.2.9	45,39	11.3.4.5	146,04
20.1.2.3	166,50	8.3.4.5	26,45
20.1.2.10	71,77	2.3.4.5	87,02
7.1.2.9	77,49	4.3.8.17	161,02
7.1.2.3	43,63	4.3.8.18	76,12
7.1.2.10	165,36	4.3.8.6	40,58
10.2.3.11	53,15	11.3.8.17	78,72
10.2.3.8	177,69	11.3.8.18	44,15
10.2.3.4	73,78	11.3.8.6	160,85
9.2.3.11	64,00	2.3.8.17	46,38
9.2.3.8	60,54	2.3.8.18	169,24
9.2.3.4	169,07	2.3.8.6	74,06
1.2.3.11	174,89	21.20.1.2	60,52
1.2.3.8	60,58	21.20.1.19	56,84
1.2.3.4	47,96	21.20.1.7	174,20

Distances (Å)	
O_{20}---C_4	4,222
O_{20}---H_{12}	4,901
H_{21}---C_4	4,299
H_{21}---H_{12}	4,797

FIGURE : 249

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,284	0,836	0
3	1,178	2,115	0,844
4	0,665	3,220	- 0,034
5	- 0,665	3,220	- 0,034
6	- 1,178	2,115	0,844
7	- 1,284	0,836	0
8	0	1,975	1,825
9	2,136	0,212	0,373
10	1,541	1,113	- 1,054
11	2,129	2,375	1,350
12	1,301	3,911	- 0,584
13	- 1,301	3,911	- 0,584
14	- 2,129	2,375	1,350
15	- 2,136	0,212	0,373
16	- 1,541	1,113	- 1,054
17	0	1,042	2,385
18	0	2,799	2,537
19	0	- 0,637	- 0,921
20	0	- 0,876	1,112
21	0,783	- 1,372	0,892

bicyclo (3.2.1) octène-6, o1-3

cycle hexagonal bateau

isomère exo

15 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
7.2.1	113,83
1.2.3	113,38
2.3.4	108,34
1.20.21	98,11
2.3.8	109,09
3.8.6	99,87
9.2.1	109,47
10.2.1	109,10
11.3.2	112,79
17.8.3	110,36
17.8.18	108,19
12.4.5	125,74
20.1.2	109,75
19.1.2	108,08
19.1.20	107,11
3.4.12	124,31
4.3.8	100,28
11.3.8	112,77
9.2.10	106,05
3.8.18	113,95
3.4.5	109,96

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	3,705
Wb . .	21,702
Wd . .	8,233
ΣW . .	33,639

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	$2\ 10^{-3}$ kcal

Dièdres (d°)			
19.1.2.9	80,60	11.3.4.12	33,11
19.1.2.3	156,84	8.3.4.12	153,29
19.1.2.10	35,04	2.3.4.12	92,48
20.1.2.9	35,89	11.3.4.5	146,89
20.1.2.3	86,67	8.3.4.5	26,71
20.1.2.10	151,53	2.3.4.5	87,52
7.1.2.9	159,33	4.3.8.17	162,90
7.1.2.3	36,77	4.3.8.18	75,16
7.1.2.10	85,03	4.3.8.6	41,01
10.2.3.11	93,17	11.3.8.17	76,90
10.2.3.8	140,70	11.3.8.18	45,04
10.2.3.4	32,41	11.3.8.6	161,22
9.2.3.11	22,47	2.3.8.17	49,24
9.2.3.8	103,66	2.3.8.18	171,18
9.2.3.4	148,05	2.3.8.6	72,64
1.2.3.11	145,02	21.20.1.2	60,97
1.2.3.8	18,89	21.20.1.19	56,13
1.2.3.4	89,39	21.20.1.7	173,23

Distances (Å)	
O_{20}---C_4	4,305
O_{20}---H_{12}	5,243
H_{21}---C_4	4,686
H_{21}---H_{12}	5,510

FIGURE : 250

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,280	0,843	0
3	1,179	2,009	- 0,995
4	0,665	1,503	- 2,311
5	- 0,665	1,503	- 2,311
6	- 1,179	2,009	- 0,995
7	- 1,280	0,843	0
8	0	2,892	- 0,551
9	1,467	1,242	1,030
10	2,156	0,197	- 0,262
11	2,122	2,584	- 1,087
12	1,303	1,187	- 3,135
13	- 1,303	1,187	- 3,135
14	- 2,122	2,584	- 1,087
15	- 1,467	1,242	1,030
16	- 2,156	0,197	- 0,262
17	0	3,114	0,515
18	0	3,829	- 1,107
19	0	- 0,584	- 0,956
20	0	- 0,970	1,031
21	0,772	- 0,685	1,509

bicyclo (3.2.1) octène-6, ol-3

cycle hexagonal chaise

isomère exo

15 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
7.2.1	113,27
1.2.3	111,29
2.3.4	109,56
1.20.21	99,22
2.3.8	107,41
3.8.6	100,05
9.2.1	109,61
10.2.1	109,69
11.3.2	113,12
17.8.3	110,29
17.8.18	108,94
12.4.5	125,85
20.1.2	112,14
19.1.2	106,67
19.1.20	105,30
3.4.12	124,13
4.3.8	100,59
11.3.8	112,20
9.2.10	106,85
3.8.18	113,52
3.4.5	110,02

Dièdres (d°)			
19.1.2.9	165,58	11.3.4.12	34,02
19.1.2.3	73,02	8.3.4.12	153,88
19.1.2.10	48,56	2.3.4.12	93,20
20.1.2.9	50,80	11.3.4.5	145,98
20.1.2.3	172,20	8.3.4.5	26,12
20.1.2.10	66,22	2.3.4.5	86,80
7.1.2.9	77,37	4.3.8.17	161,35
7.1.2.3	44,03	4.3.8.18	76,08
7.1.2.10	165,61	4.3.8.6	40,08
10.2.3.11	53,19	11.3.8.17	78,13
10.2.3.8	177,56	11.3.8.18	44,44
10.2.3.4	74,03	11.3.8.6	160,60
9.2.3.11	63,83	2.3.8.17	46,80
9.2.3.8	60,54	2.3.8.18	169,36
9.2.3.4	168,95	2.3.8.6	74,47
1.2.3.11	174,76	21.20.1.2	9,10
1.2.3.8	60,87	21.20.1.19	124,72
1.2.3.4	47,55	21.20.1.7	119,67

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	3,036
Wb . .	21,720
Wd . .	6,168
ΣW . .	30,924

Distances (Å)	
O_{20}---C_4	4,211
O_{20}---H_{12}	4,869
H_{21}---C_4	4,404
H_{21}---H_{12}	5,035

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2"
ΔW	10^{-4}kcal

FIGURE : 251

Atomes	Coordonnées (Å)		
	x	y	z
1	0	0	0
2	1,285	0,834	0
3	1,178	2,112	0,845
4	0,665	3,213	- 0,037
5	- 0,665	3,213	- 0,037
6	- 1,178	2,112	0,845
7	- 1,285	0,834	0
8	0	1,974	1,826
9	2,145	0,211	0,356
10	1,537	1,115	- 1,054
11	2,129	2,374	1,351
12	1,302	3,902	- 0,589
13	- 1,302	3,902	- 0,589
14	- 2,129	2,374	1,351
15	- 2,145	0,211	0,356
16	- 1,537	1,115	- 1,054
17	0	1,043	2,391
18	0	2,802	2,534
19	0	- 0,613	- 0,937
20	0	- 0,954	1,047
21	0,847	- 0,768	1,439

bicyclo (3.2.1) octène-6, ol-3

cycle hexagonal bateau

isomère exo

15 variables

fonctions du tableau 8

Angles (d°)	
7.2.1	114,04
1.2.3	113,22
2.3.4	108,10
1.20.21	99,99
2.3.8	109,26
3.8.6	99,87
9.2.1	109,97
10.2.1	108,99
11.3.2	112,80
17.8.3	110,25
17.8.18	108,26
12.4.5	125,77
20.1.2	111,50
19.1.2	107,34
19.1.20	104,47
3.4.12	124,27
4.3.8	100,31
11.3.8	112,78
9.2.10	105,40
3.8.18	114,00
3.4.5	109,96

Dièdres (d°)			
19.1.2.9	80,98	11.3.4.12	33,11
19.1.2.3	155,56	8.3.4.12	153,33
19.1.2.10	34,09	2.3.4.12	92,32
20.1.2.9	32,86	11.3.4.5	146,89
20.1.2.3	90,60	8.3.4.5	26,67
20.1.2.10	147,94	2.3.4.5	87,68
7.1.2.9	160,25	4.3.8.17	162,92
7.1.2.3	36,79	4.3.8.18	75,08
7.1.2.10	84,67	4.3.8.6	40,95
10.2.3.11	93,34	11.3.8.17	76,84
10.2.3.8	140,37	11.3.8.18	45,16
10.2.3.4	32,09	11.3.8.6	161,19
9.2.3.11	21,74	2.3.8.17	49,46
9.2.3.8	104,55	2.3.8.18	171,46
9.2.3.4	147,17	2.3.8.6	72,51
1.2.3.11	145,19	21.20.1.2	0,27
1.2.3.8	18,91	21.20.1.19	115,36
1.2.3.4	89,38	21.20.1.7	129,01

Energie (kcal/mole)	
Wa . .	4,581
Wb . .	22,401
Wd . .	10,968
ΣW . .	37,950

Distances (Å)	
O_{20}---C_4	4,356
O_{20}---H_{12}	5,286
H_{21}---C_4	4,250
H_{21}---H_{12}	5,111

$\Delta\theta_{2.1.7}$	2'
ΔW	10^{-2}kcal

FIGURE : 252